

修士学位論文

多価イオン電荷交換分光における

極端紫外領域での

発光断面積の絶対値測定

指導教授 田沼 肇 教授

2020 年 01 月 10 日 提出

首都大学東京大学院
理工学研究科 物理学専攻
学修番号: 18844409

氏名: 大那 拓海

概要

1990年に打ち上げられたX線観測衛星ROSATは軟X線放射に関して全ての方向に向けて観測を行い、ROSAT All Sky Survey Dataとして知られている全天マップを作成した。その際に、特定のX線放出天体が存在しない領域においても背景放射と考えられる軟X線が放出されていることを発見した。しかも、その強度は数日間の周期で変動しており、軟X線放射の起源に関する議論が持ち上がった。当時は、局所高温バブル (Local Hot Bubble, LHB) による可能性が高いと考えられていたが、今日ではLOBだけではなく、太陽風に含まれるCやOなどの多価イオンが地球近傍や太陽系内に存在する希薄なHやHeなどの中性粒子と衝突し、電荷交換反応によって生成した励起状態から発光する輝線の寄与が大きいことが判明している。この背景放射はあらゆる方向からも観測されてしまうため、X線天文衛星によって観測された輝線に関して定量的な解析を行うためには、電荷交換断面積や発光断面積の絶対値が必要である。しかしながら、信頼できる断面積の絶対値が十分に揃っているという状況にはなっていないのが現状である。

その理由の一つは、全ての立体角に放出される軟X線発光について、高い精度での発光断面積の測定が困難なことである。本研究では、太陽風電荷交換反応が起こる宇宙空間とほぼ同じ衝突条件下で、裸およびHe様の炭素、窒素、酸素の多価イオンと中性粒子の電荷移行衝突における分光スペクトル観測実験を行った。そして、原子基底緊密結合 (Atomic Orbital Close Coupling, AOCC) 法による高精度な電荷移行断面積の理論計算値および励起状態間の光学遷移速度に関する文献値を用いて、実測スペクトルに対応する理論的なスペクトルを計算した。そして、実測値と計算値を比較することで、観測波長に依存する装置の絶対検出感度を求めた。

本研究室では、14.25 GHz 電子サイクロトロン共鳴型イオン源を用いた多価イオン衝突実験が可能である。本研究では、多価イオンと中性気体標的が衝突した際の電荷移行反応に伴う軟X線から極端紫外領域の発光の観測を行った。装置は発光の偏光度による影響を受けないよう、イオンビーム軸から見て魔法角 (54.7°) に当たる方向から観測するように設計されている。観測に用いた斜入射型分光器は、金薄膜コーティングされた集光用ミラー、収差補正型フラットフィールド・ポリクロメーター用凹面ラミナーレプリカ回折格子、電子冷却式CCDカメラから構成されており、それぞれの反射効率、回折効率、および検出効率に関するカタログデータは提供されているものの、それぞれの信頼性については疑問が残る。また、観測している立体角の大きさについてもアラインメントによって大きく変わる余地があり、さらにはミラーと回折格子の間に設置したスリットによっても観測される強度は変わることから、測定されたデータだけから高い精度で発光断面積を求めることは困難である。

一方、裸の多価イオンおよび閉殻系である He 様イオンを入射粒子とし標的気体を He にした場合の AOCC 計算では、擬似的な一電子問題として計算を行うため、二電子捕獲過程は考慮できないものの、主要な過程である一電子捕獲過程については十分に信頼できる断面積が得られると考えられている。共同研究者によって計算された電子捕獲断面積と、本研究で開発した時間に依存した電荷移行衝突過程のシミュレーションプログラムを用いて、観測領域からの発光スペクトルを計算し、実測スペクトルとの比較を行った。実測スペクトルの観測に際しては、標的気体密度、イオンビーム電流強度、および露光時間について慎重な測定を行い、これらの測定誤差を考慮した上で、2 - 27 nm の波長範囲にある計 13 本の輝線について、理論値と実測値の比から絶対的な検出効率を求めた。

得られた検出効率は波長 10 nm 付近に極大を持っていた。本研究で使用した回折格子は 5 - 20 nm の波長領域用に開発されたもので、8 nm 付近に最も高い回折効率を持っている。また、斜入射の金ミラーも 8 nm より長波長では 90% 程度の高い反射効率を持つが、2 nm では 45% 程度にまで低下してしまう。これらのことから、短波長領域における検出効率の低下は、集光ミラーと回折格子の特性に依ると理解できる。また、10 nm より長波長領域での検出効率の低下は、回折格子の特性に加えて、CCD 表面の薄い SiO₂ 層および炭素を含む汚染物質に起因すると考えられる。これらの各要素について正確な見積をすることは困難であるが、理論計算値との直接比較によって絶対検出感度を推定する方法は、理論計算の精度が高ければ極めて有効な方法と言える。特に、圧力測定およびイオンビーム強度測定を今回と同じ計器を用いて行う場合には、測定機器の系統誤差がキャンセルできる点は特筆に値する。

以上の結果から、分光器の測定条件を同一にしている限り、2 - 27 nm の波長範囲において、高い精度で発光断面積の絶対測定を行うことが可能となった。

目次

第1章序論6

1.1 多価イオン物理学.....	6
1.2 低速多価イオン衝突.....	6
1.3 多価イオン源.....	7
1.3.1 ECRIS(Electron Cyclotron Resonance Ion Source)	8
1.3.2 EBIS(Electron Beam Ion Source)	8
1.4 太陽風電荷交換反応(Solar Wind Charge Exchange).....	9
1.4.1 太陽風	12
1.4.2 先行研究	12
1.4.3 研究目的	12

第2章 原理14

2.1 ECRIS(Electron Cyclotron Resonance Ion Source)	14
2.2 電荷交換反応	17
2.2.1 COBM (Classical Over-Barrier Model, 古典的オーバーバリアモデル)17	

第3章実験方法28

3.1 実験装置.....	28
3.1.1 ECRIS	28
3.1.2 ビームライン.....	30
3.1.3 斜入射分光器.....	32
3.2 測定方法.....	37
3.2.1 magic angle	37
3.2.2 発光観測方法.....	38
3.2.3 ビーム強度モニター.....	38
3.2.4 標的ガス圧力.....	39
3.2.5 分光.....	40
3.3 斜入射分光器の波長較正.....	40

第4章 シミュレーション手法43

4.1 概要.....	43
4.2 理論的発光断面積.....	43

第 5 章 実験結果 45

5.1 裸イオン	45
5.2 He 様多価イオン	50

第 6 章 実験結果とシミュレーションの比較 55

6.1 発光強度比分布	55
6.2 実験と計算の結果の比較	57
6.3 実験装置の検出感度について.....	57
6.4 誤差評価.....	61
6.5 理論的発光断面積の比較.....	61

第 7 章 まとめ 63

第1章序論

1.1 多価イオン物理学

原子物理学において、多価イオンを対象とした研究は様々な発展を遂げて来た。多価イオンとは中性の原子や分子から電子を2つ以上剥ぎ取ったものである。多価イオンはクーロンポテンシャルによる莫大な内部エネルギーを持っており、他の物質との相互作用が大きいことが知られている。

現代社会においては、半導体製造、医療など様々な分野において多価イオンを用いた研究が役立てられている。一方で、多価イオンの分光学的特性やその衝突過程に関しては未知の部分が多く、多価イオンと物質との相互作用に関するデータが、様々な応用分野から基礎データとして必要とされている。

1.2 低速多価イオン衝突

多価イオンと中性原子の衝突において想定される非弾性過程としては以下の4つが挙げられる。

$$X^{q+} + Y \rightarrow \begin{cases} X^{(q-r)+} + Y^{r+} : \text{電荷移行反応} \\ X^{q+} + Y^{r+} + re^{-} : \text{標的のイオン化} \\ X^{(q+r)+} + Y + re^{-} : \text{入射イオンのイオン化} \\ X^{q+} + Y^{*} : \text{標的の励起} \end{cases}$$

これらの反応の起こり易さは衝突粒子間の相対速度によって異なる。衝突粒子間の相対速度における「低速」及び「高速」の判断基準としては、標的内電子の古典的な速度が用いられる。イオンと標的が非常に速い速度で衝突すると、標的に束縛された電子が多価イオンに捕られ難くなるので標的のイオン化断面積が大きくなり、また多価イオン自身の電子が剥がされる入射イオンのイオン化断面積も大きくなる。逆に、イオンと標的が電子の運動速度以下で近づけば、多価イオンのクーロン力によって引き出された標的内の電子はイオンの電子軌道に移り易く、電荷移行反応が主要になる。本研究で実験を行った「低速」と定義する速度領域は、衝突する粒子同士の相対速度が古典的な水素原子内電子の軌道速度である1 a.u. ($\approx 2.19 \times 10^6$ m/s) よりも遅く、衝突反応においてイオン化よりも電荷移行が優勢になる速度領域である。多価イオンは非常に大きな内部エネルギーを持っている為、電荷移行衝突過程において単に標的の最外殻電子が移行する以外の現象も見られる。低速多価イオン衝突においては、内殻の電子を抜き取ることが可能なので標的粒

子の内殻励起状態が生成され得る。また複数の電子捕獲によってできる多重励起状態が脱励起する際に他の電子がその余剰エネルギーによって放出される「オージェ効果」という現象も見られる。多電子移行過程においては、一度に複数の電子を失った分子や固体表面がクーロン斥力によって崩壊するというクーロン爆発という現象も知られている。その為、原子レベルでの静的過程だけでなく動的過程にも関心が持たれ、多価イオンに関する多くの研究がなされている。

1.3 多価イオン源

多価イオンを用いた実験が1970年代から飛躍的に進展した要因の一つとして、多価イオン源の小型化と性能向上が挙げられる。高性能な多価イオン源の出現に依って、プラズマ中の多価イオンの発光を観測する従来の受動的な分光学的研究に替わり、直接イオン源から多価イオンを取り出して粒子や固体に衝突させ能動的に多価イオンの原子過程を調べる研究が盛んに行われるようになった。

多価イオン源として現在用いられているものは、大別すると次の6種類に分けられる。

-
- (1) 放電型
 - (2) ストリッピング型
 - (3) リコイル2次イオン型
 - (4) 光イオン化型
 - (5) ECRIS (Electron Cychrotron Resonance Ion Source)
 - (6) EBIS (Electron Beam Ion Source), EBIT(Electron Beam Ion Trap)
-

(1) 放電型は最も簡単な原理である為に古くから利用されてきたイオン源である。不定で多電子を剥ぎ取ることは難しく、比較的低価数のイオンしか生成出来ないが、最近では改良が施されてペニング(PIG)イオン源やデュオプラズマトロンイオン源等が使用されている。

(2) ストリッピング型は別のイオン源で生成された低価数の1次イオンをMeV以上に加速して、C等の薄膜を通過させることで、衝突によりイオン自身を電離させる方法である。最近、薄膜の代わりにプラズマを通過させることで電離させる方法も研究されている。

(3) リコイル2次イオン型は、1次イオンが標的ガスを電離することで目的のイオンを生成する方法である。(2)及び(3)は、何れも高エネルギーの1次イオンを必要とするので、加速器施設で用いられる。

(4) 光イオン化型は、強力なレーザーをターゲット物質に照射して、イオンを生成させる方法である。

(5)ECRIS と(6)EBIS は逐次電離を用いた方式で、価数の高いイオンを生成することが可能であり、上に述べた6種のイオン源のうち現在最も広く用いられてる。

多価イオンを生成する際、中性粒子を逐次電離していく方法は同時に多重電離させる方法よりも以下の2点において優れている。先ず挙げられるのは、同時に多数の電子を剥ぎ取る場合よりも与えるエネルギーが少なく良い点である。*Carlson et al.* による計算でも示されているように、原子及びイオンのイオン化エネルギーは電離度が大きくなるに従い増加する[1]。同時に電離する場合は全てのイオン化エネルギーの総和を一度に与えなければならないのに対し、逐次電離という方法では最後に電離される1s軌道電子の電離エネルギーさえ与えれば、裸イオンの生成も可能である。次に、同時に多数個の電子を電離する多電子電離断面積は*Lotz et al.* による半経験的な理論で与えられる1電子電離断面積に比べ圧倒的に小さいので、例え多重電離に必要なエネルギーを注入出来たとしても1電子ずつ電離させた方が生成断面積が大きくなるという点が挙げられる[2]。例えば*Schram et al.* による中性Ne原子の電子衝突による Ne^{q+} の生成断面積測定によれば、直接 Ne^{5+} が出来る断面積は Ne^{4+} から Ne^{5+} が出来る逐次電離の場合より4桁も小さい[3]。断面積は価数が増えるに従って減少するが、その減り方も多電子電離断面積の方が著しい。

これらの事実から、多電子の同時電離による多価イオン生成法よりも長時間イオンを閉じ込め逐次電離していく生成方法の方が、エネルギー的にも多価イオン生成効率の点でも優位にあることが理解出来る。次に、逐次電離を用いたECRIS とEBIS について簡単に述べる。

1.3.1 ECRIS (Electron Cynchotron Resonance Ion Source)

ECR 型イオン源はフランス原子力庁グルノーブル核融合研究所の*Geller et al.* により開発された[4, 5]。磁場中でサイクロトロン運動する電子をマイクロ波によって共鳴的に加速させ、試料ガスとして入れた原子や分子を逐次電離するという方法で多価イオンを生成する。その過程で生成されるプラズマは、ミラー磁場と六極磁場によって閉じ込められる。イオンビームとして使用する時は、プラズマから漏れ出たイオンを静電的に引き出すことにより得られる。価数が中程度であり、プラズマポテンシャルによってイオンビームのエネルギー幅が大きく、また準安定状態のイオンも生成するという欠点もあるが、 μA から mA 程度の大電流のイオンを安定に供給することが出来るという点で他のイオン源よりも優れている。

現在、多くの重イオン加速器のイオン入射系で用いられている。

1.3.2 EBIS (Electron Beam Ion Source)

EBIS は旧ソ連のドブナ原子核研究所の*Donets* によって提唱され実現された[6, 7]。強磁場により高密度化した電子ビームを用いて、電子ビームの空間電荷による動径方向の電場と軸方向に設けた外部電場により、生成イオンを電子ビーム内に閉じ込めて逐次電離を行う。ECR 型イオン源に比べビーム強度では大幅に劣るが、逐次電離効率が高く

生成イオンの価数分布が狭い。薄膜等によるストリッピングでの電離が不可能な低エネルギー領域での高電離型イオン源として強力である。また同じ原理で多価イオンを生成し、電子ビーム内にイオンをトラップするEBIT (Electron Beam Ion Trap) では、重元素で裸に近い状態のイオンの生成や、電子とイオンの相互作用を分光学的に観測することも可能となっている。

1.4 太陽風電荷交換反応(Solar Wind Charge Exchange)

宇宙におけるX線背景放射は、個々の天体から放射されるX線とは異なり宇宙のあらゆる方向からやってくる。2 keV以上のエネルギー領域ではそのほとんどが多くの暗い系外X線天体からのX線が重なったものと考えられていて、実際に2-10 keVのエネルギー領域では、すでに殆どすべてが微弱なX線源に分離されている[8]。一方、1 keV以下のエネルギー領域では銀河系外の点源の関与は少なく、半分以上がわれわれの銀河系の円盤やハローに存在する高温星間物質によるものと考えられており、銀河系外の高温銀河間物質によるものの可能性もある。このような広がった高温ガスの存在はX線天文学の初期段階では知られていたが[9]、その分布や起源、物理状態についてはほとんど分かっていなかった[10]。

1990年代に、ドイツの天文衛星ROSATによって軟X線全天探査が行われ図1.1にある軟X線背景放射に関する精密な全天地図の作成が行われた。その際観測データに、1日程度の時間スケールで2倍以上増光する強度変動が観測された[11]。銀河系の円盤やハローの高温星間物質であれば日という短い時間スケールで強度変動を起こすことは考えられないため、謎のX線増光は太陽系が起源であると考えられたが、当時はその起源を突き止めることができなかった。ところが、図1.3に示すように1996年には百武彗星からのX線の放射が発見された[12]。この百武彗星を皮切りに、様々な彗星からのX線放射が次々と発見され、軟X線放射は多くの彗星に共通してみられる事象であることがわかった。その後の研究により、発見の原因は太陽風に含まれる多価イオンと彗星の中性物質との衝突による電荷交換反応であることがわかった。彗星からのX線放射が電荷交換反応によることが認識されるにつれ、軟X線背景放射の一部は太陽風と地球近傍や太陽系内の中性物質との衝突による電荷交換反応によるものと考えられるようになった[13][14]。

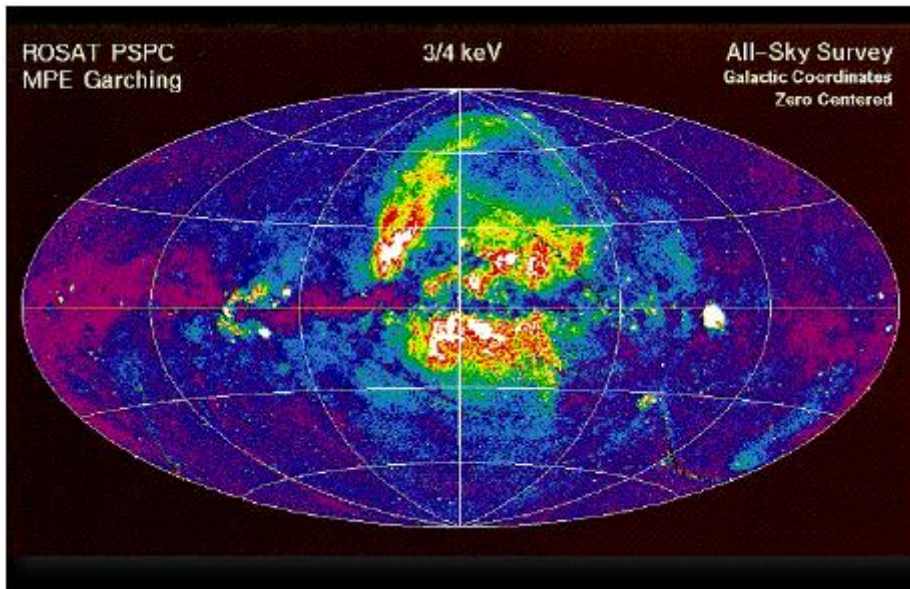


図1.1: ROSAT 衛星による軟X線全天マップ[11]

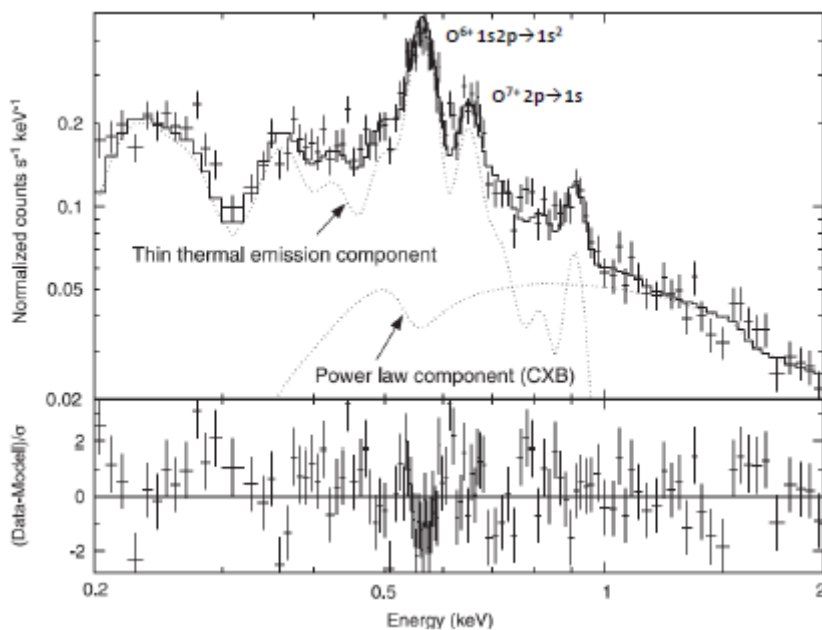


図1.2: すざく衛星による軟X線スペクトル[14]

ROSAT衛星の全天探査中に見られた謎のX線増光は太陽風のフラックスと相関があることが示され[15], 太陽風による電荷交換反応であることがわかってきた. すざく衛星によって得られた軟X線のスペクトルを図1.2に示す. O^{7+} の一電子捕獲後による $O^{6+}1s2p \rightarrow 1s^2$ の遷移が主要な発光ラインとして観測されており, 続いて O^{8+} の一電子捕獲後の

$O^{7+}2p \rightarrow 1s$ 遷移が太陽風電荷交換反応においては主要な遷移である。その他にも、太陽風に含まれる炭素やネオン、マグネシウムなどのスペクトルも得られている。

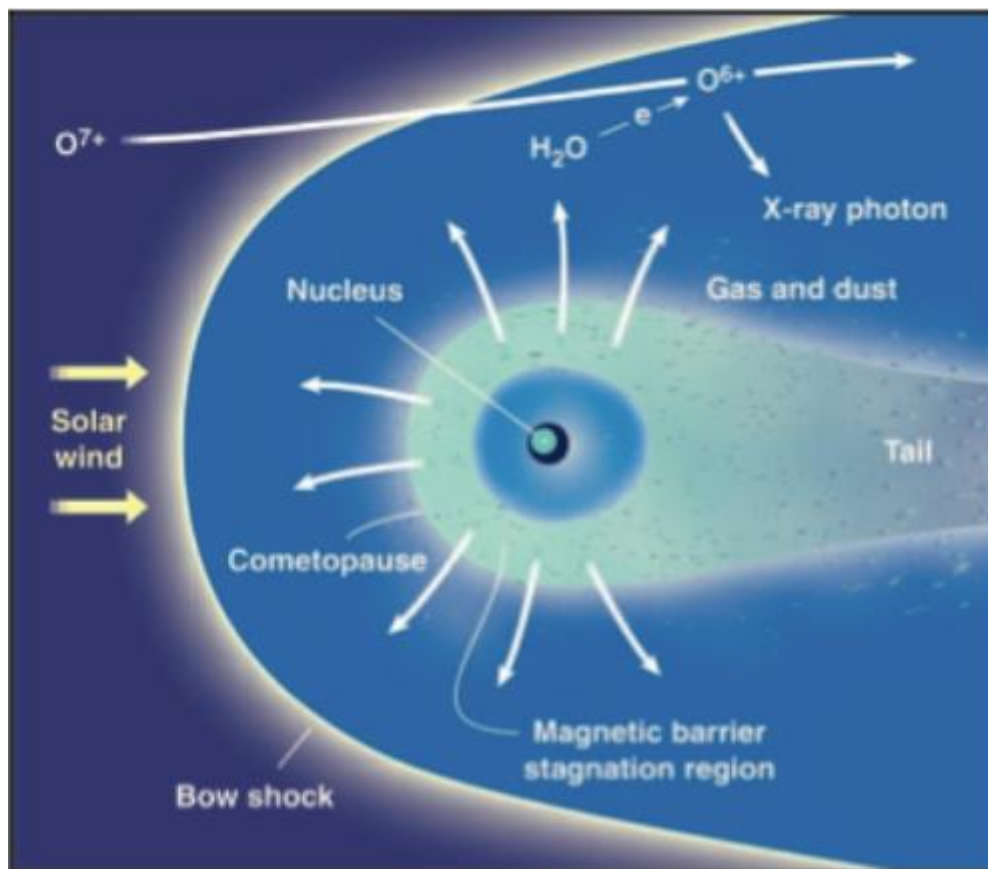


図1.3: 百武彗星近傍からの軟X線発光模式図[12]

近年は、太陽系以外の場所でも電荷交換反応が見つかっており、代表例としては、Cygnus Loopの超新星残骸があげられる[16]. Cygnus Loopの縁の方向に関して詳細にスペクトルを解析していくと、熱放射やシンクロトン放射では説明できない領域があり、この領域で起こっている反応が電荷交換反応であると考えられている。とりわけ、 O^{7+} の一電子捕獲後による O^{6+} の $n=3-5$ の励起状態から基底状態への遷移が、許容、禁制遷移ともに観測されており、電荷交換反応である可能性が示されている。

また、M82銀河方向からも電荷交換反応に由来するX線が観測されている[17]. この方向からは、He様O, Ne, Mgの $1s2p \rightarrow 1s^2$ 遷移が観測されている。熱的に励起される環境では観測されにくい3重項状態からの発光も含まれていることから、電荷交換反応由来のものであることがいえる。

このように、近年では宇宙空間のさまざまな場所からも電荷交換反応が発見されるようになり、詳細な解析のためにも実験室での反応の再現が求められている。

1.4.1 太陽風

太陽風は電氣的に中性なプラズマの流れであり、以下のような種類の粒子で構成されている。

負の電荷	正の電荷
e	H^+ , He^{2+} , C^{q+} , O^{q+} , Ne^{q+} ...

それぞれの多価イオンの価数 q は、水素様や裸に対応する。正電荷のうち約95%は H^+ 、4%程度が He^{2+} であり、それ以外がその他の重イオンに相当する。地球付近での密度は 1cm^3 中に10個程度である。速度には2成分あり、遅い成分が300-400 km/s, 速い成分が700-800km/sである。太陽風が地球へ到達する際には地磁気の影響をイオンが受けるため、斜め 45° 方向から入射している。

1.4.2 先行研究

太陽風電荷交換反応の実験室における研究は2000年頃から始まり、現在までに様々なグループで実験が行われてきた。Greenwoodら[18]は水素様や裸のO, Ne イオンを彗星に含まれる H_2O や CO_2 をターゲットにした研究を行い、X線分光や、断面積の測定が行われた。しかし、X線分光測定に関しては、検出器にBe窓付きのGe 検出器を用いており、発光の絶対値を出すには至っていない。また、我々の以前の研究成果[19]において得られた窓無しSi(Li)検出器の結果と比較しても、相違は明確に出ている。一方、Oak Ridge のグループ[20]ではC, Oの水素様、裸のイオンをH原子と合流ビーム法を用いて電荷移行断面積の測定を行っている。この手法ではイオンと原子の相対速度を変えることにより、低エネルギー領域まで測定することが可能である。また、Lawrence Livermore National Laboratory ではEBIT を用いた分光実験が行われ[21]、生成した O^{7+} イオンを彗星に含まれる CO_2 , CH_4 などのターゲットガスを導入することで、低エネルギーの電荷交換反応を実現している。このグループでは既にマイクロカロリメータを用いた測定も行われているが、EBITでの実験ではイオンの速度が太陽風の速度より非常に遅いため、実際の太陽風の観測に役立てるのは難しいというのが現状である。

これまで、我々の研究室では多価イオン衝突に伴う発光観測実験を行ってきた。発光の絶対値を検討するため、分岐比を用いて理論的発光断面積を計算することで実験との比較を行った研究 [19] や、時間発展が考慮された理論的発光断面積と、実際の実験との対応を取った研究[22]もあったが、詳細な装置関数を求めるには至っていない。

1.4.3 研究目的

本研究室では、14.25 GHz電子サイクロトロン共鳴型イオン源を用いた多価イオン衝突実験を行っている。この実験では、多価イオンと中性粒子が衝突した際の電荷移行反応とそれに伴う発光の観測を行っている。このうち発光観測実験では、発光断面積を測定することを目的として、励起状態に捕獲された電子が脱励起する際に放出される輝線を観測している。

しかし、現在使用している発光観測系では、分光器や検出器の波長に依存する効率が分かっておらず、輝線強度の絶対値を決定することができない。そのため発光断面積の絶対値の決定が困難であるという問題があった。そこで本研究では、この発光観測系の装置関数を決定することを目的に、計算と実験の両面で検証を行った。

第 2 章原理

この章では本研究で使⽤した多価イオン源(ECRIS)における多価イオン生成の原理と、多価イオンと標的気体が衝突する際の電荷移行反応を COBM (Classical Over the Barrier Model, 古典的オーババリアモデル) を⽤いて説明する.

2.1 ECRIS (Electron Cyclotron Resonance Ion Source)

磁場中において運動する電荷はローレンツ力によって磁力線に巻き付く様な螺旋運動を行う. 電荷を q , 磁束密度を B , 電荷の質量を m , 磁場に垂直な速度成分を v_{\perp} とすると,

$$m \frac{dv_{\perp}}{dt} = qv_{\perp} B \quad (2.1)$$

となる従って, この螺旋運動の周波数 ω は,

$$\omega = \frac{v_{\perp}}{2\pi r} \quad (2.2)$$

$$= \frac{qB}{2\pi m} \quad (2.3)$$

と表され, サイクロトロン周波数と呼ばれている. 電⼦の場合には $m = m_e$, $q = e$ であるので, 電⼦サイクロトロン周波数 ω_e は,

$$\omega_e = \frac{eB}{2\pi m_e} \sim 2.80B \times 10^{10} \text{Hz} \quad (2.4)$$

となる. この電⼦サイクロトロン周波数に等しい周波数のマイクロ波を電⼦に印加すると, 共鳴的に吸収し電⼦の運動エネルギーが増大する. これを ECR (Electron Cyclotron Resonance, 電⼦サイクロトロン共鳴) という.

本研究では ECR を利⽤した多価イオン源である ECRIS (Electron Cyclotron Resonance Ion Source) というイオン源を⽤した. ECR 加熱された電⼦が中性粒子・多価イオンと衝突することで電⼦を叩き出し逐次電離することによって多価イオンを生成するイオン源である.

電⼦はイオンより質量が極めて小さいので, プラズマ中での熱運動の速度はイオンに比

べて圧倒的に大きい。この為、電子の方が拡散し易く電荷分離が起きてプラズマの中性状態が崩れるが、同時に電子とイオンの間に互いに引き合うクーロン力が働くので、電子の拡散が抑えられ逆にイオンの拡散は加速されていく。こうしてプラズマは中性状態を保ちながら、電子はイオンと同速度で拡散することになる。従って、電子を閉じ込めることによってプラズマを閉じ込めることが出来る。

ECR において一様な磁場を掛けていてはプラズマを閉じ込めることが出来ないので、ECR イオン源では軸方向はミラー磁場、動径方向は 6 極磁場を用いることでプラズマの閉じ込めを可能にしている。ミラー磁場は図 2.1 に示すように両端の磁場を強くした紡錘形の磁場配位で、ミラー効果によってプラズマを中央に閉じ込めるものである。

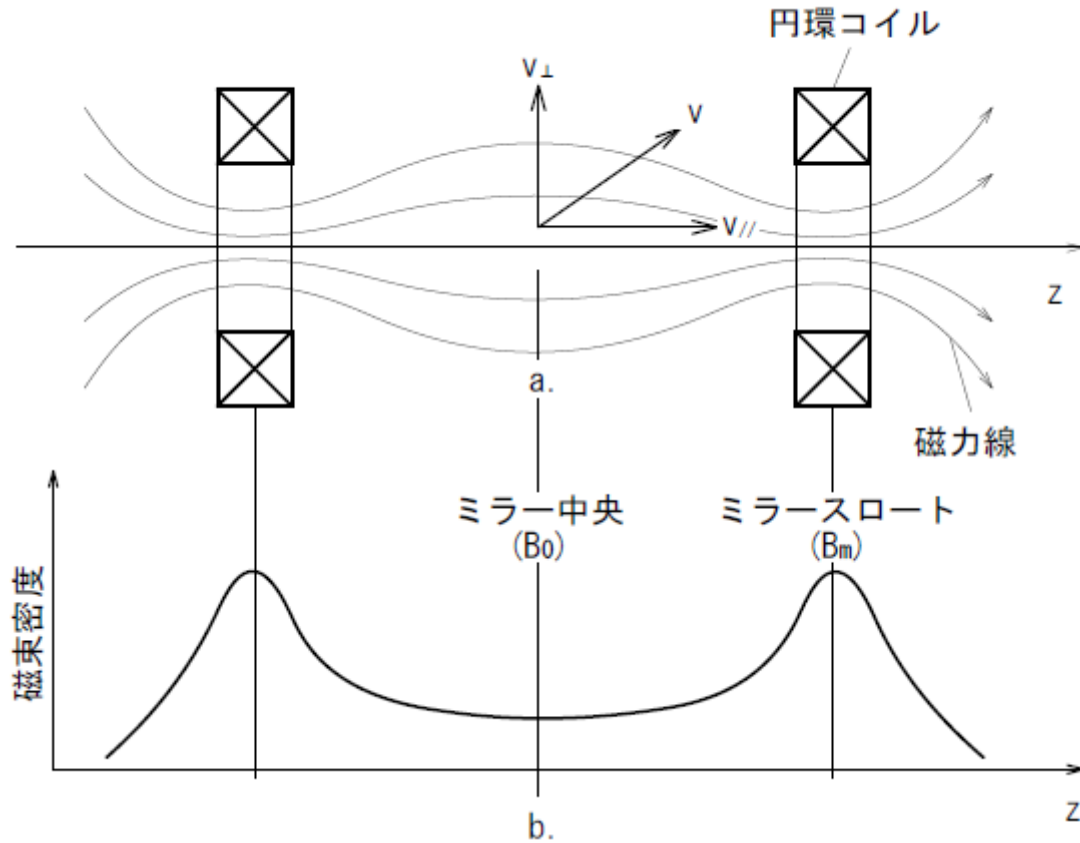


図 2.1: a. コイル配置と磁力線, b. 磁束密度

ミラー中央面の磁束密度を B_0 , 両端の強い部分(ミラーズロート)の磁束密度を B_m とし, 中央面を通過する時の荷電粒子の速度を v_0 , 磁力線とのなす角度(ピッチ角)を θ とする. ここで $v_{\parallel} = v \cos \theta$, $v_{\perp} = v \sin \theta$ とすると, 荷電粒子の磁気モーメント μ と全運動エネルギー ϵ は,

$$\mu \equiv \frac{mv_{\perp}^2}{2B} \quad (2.5)$$

$$\epsilon \equiv \frac{(mv_{\parallel}^2 + mv_{\perp}^2)}{2} \quad (2.6)$$

と表される. これらが保存されるとすると, ミラースロートに進むに従い磁場が強くなるので垂直方向の運動エネルギーは大きくなり, 平行方向の運動エネルギーは小さくなっていく. ミラー磁場の最大値 B_m より小さい磁場の所で $v_{\parallel} = 0$ となると, その点で粒子は反射され中央方向へ戻って行く. これがミラーと呼ばれる理由である. ミラー磁場の最大値 B_m と最小値 B_0 の比をミラー比と呼ぶ. ミラースロートで丁度反射される粒子のピッチ角を θ_L とし, ミラー比を R_m とすると, 保存則から次式が得られる.

$$R_m = \frac{B_m}{B_0} = \frac{1}{\sin^2 \theta_L} \quad (2.7)$$

θ_L より小さいピッチ角を有する粒子は, 最大磁場 B_m の点でも v_{\parallel} が 0 になれないのでミラーから出てしまいい閉じ込められない. このような角 θ は速度空間で円錐をつくり, ロスコーンと呼ばれている. 一方, 動径方向に関しては 6 極磁石に依って図 2.2 の様な磁場が働いており, 軸方向と同様の原理で荷電粒子は中心付近に閉じ込められる.

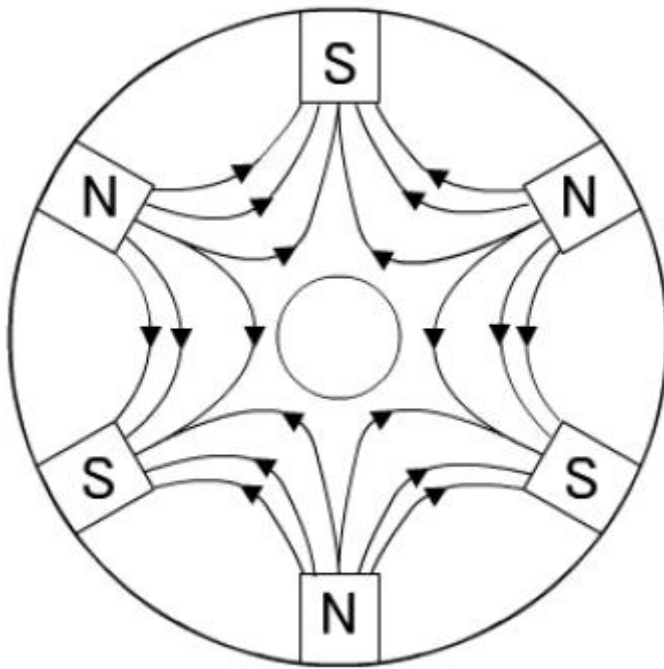


図 2.2: 6 極磁石の作る磁場

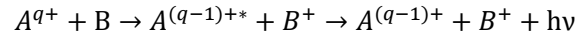
ECR イオン源はこの原理を利用して電子を閉じ込めることで, プラズマを閉じ込め多価イオンを生成し, 引き出し口側をプラズマチャンバーより低電位にすることで多価イオンを多価イオンビームと

して引き出している.

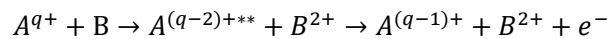
2.2 電荷交換反応

多価イオンと中性気体が衝突して起こる電荷交換反応過程には以下のものが考えられる.

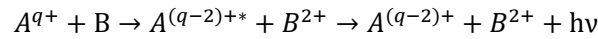
Single Electron Capture:



Transfer Ionization:



True Double Capture:



1 電子捕獲である Single Electron Capture は衝突エネルギーが数十～数百 keV 程度の範囲において主要な反応であり, 電荷移行断面積はほぼ一定値をとる. 電子捕獲過程が主要となる領域では衝突する粒子の相対速度が古典的な水素原子内の電子の軌道速度である 1 a.u.よりも遅いことを意味する. 1 a.u.の速さで移動するイオンの運動エネルギーは 2 keV/amu である. 電子捕獲過程における顕著な特徴として, 電子がイオンの特定の状態に選択的に捕獲されることがあげられる.

2 電子を捕獲する過程には 2 つの経路が存在する. 1 つは, 2 電子を捕獲したうち, 一方の電子は光を出さずにもう一方の電子にエネルギーを与えて脱励起し, エネルギーを受け取った電子が飛び出しイオン化する Transfer Ionization である. この反応過程は最終的に入射イオンの価数が変わらないことから, Single Electron Capture との区別が難しい. もう 1 つの経路は, 2 電子を両方とも捕獲する True Double Capture である. この反応では, 光を放出することで, 脱励起をする過程である. 近年では測定技術の向上により, 多電子捕獲に関する実験が様々な系によって行われており, 断面積の小さい電子捕獲以上が実験で観測されている. 3 電子以上の場合でも同様に複数の経路が存在する. とりわけ, Recoil Ion Momentum Spectroscopy(RIMS) という実験手法では, 反応後のすべてのイオンなどを測定することで, より精密な測定が可能となった.

2.2.1 COBM (Classical Over-Barrier Model, 古典的オーバーバリアモデル)

オーバーバリアモデルとは, 多価イオンと標的粒子の間のポテンシャル障壁が電子の束縛エネルギーより下がった時に電子は移行できるという考えから, 電荷移行反応によって移行する電子が捕

獲される準位の主量子数を推定するものである。このモデルは最初 H.Ryufuku *et al.* によって裸イオンと水素原子という最も簡単な1電子系について定式化され[23], その理論を A. Bárány *et al.* が多電子系に拡張し[24], さらに A. Niehaus が精密化を行った[25]。Niehaus のモデルは ECBM (the Extended Classical over-Barrier Model)あるいは MCBM (the Molecular Coulombic Barrier Model) と呼ばれており, 現在最も広く受け入れられている標準的なモデルである。

1 電子系モデル

このモデルは基本的に原子間距離 R だけに依存する1次元モデルである。価数 Z_A の原子核 A を座標原点に置き, 電子及び価数 Z_B の原子核 B の座標をそれぞれ x, R とすると, 電子に対するポテンシャルは次式で与えられる。

$$V(x, R) = -\frac{Z_A}{x} - \frac{Z_B}{R - x} \quad (2.8)$$

A と B の間($0 < x < R$)にはポテンシャルが極大となる位置が存在する。3次元的に考えると極大ではなく鞍点(saddle point) であるから, その位置を x_{sp} とすると,

$$\left. \frac{dV(x, R)}{dx} \right|_{x=x_{sp}} = \frac{Z_A}{x_{sp}^2} - \frac{Z_B}{(R - x_{sp})^2} = 0 \quad (2.9)$$

という条件を満たすことになり, 次の結果が得られる。

$$x_{sp}(R) = \left(1 + \sqrt{\frac{Z_B}{Z_A}} \right)^{-1} R \quad (2.10)$$

$$V_{sp}(R) = -\frac{1}{R} \sqrt{Z_A + Z_B}^2 \quad (2.11)$$

電子が初め原子核 Z_B の周りにある場合, その電子のエネルギーは原子のイオン化エネルギーを $I_B (= Z_B^2/2)$ とすると, $-I_B$ に等しい。A と B が接近するにつれて B に束縛された電子のエネルギー E_B は A の作るクーロン場による摂動の為に徐々に低下するが, 鞍点の下がり方の方が急である為

にある核間距離 R において両者は一致する.

$$E_B(R) = -I_B - \frac{Z_A}{R} = -\frac{Z_B^2}{2} - \frac{Z_A}{R} = V_{sp}(R) \quad (2.12)$$

この条件を満たす核間距離(critical internuclear distance) を R_c , ポテンシャルエネルギーを V_c とすると,

$$E_c(R) = \frac{Z_B + 2\sqrt{Z_A Z_B}}{I_B} \quad (2.13)$$

$$V_c(R) = \frac{(\sqrt{Z_A + Z_B})^2}{Z_B + 2\sqrt{Z_A Z_B}} I_B \quad (2.14)$$

となる。 $R < R_c$ の領域では, 電子は A と B の両方の核に共有されるので準分子状態 (quasi-molecular state) と呼ぶことが出来る. 再び A と B が離れると電子はどちらかの原子核に束縛される. 電荷移行反応が起こって電子が A に捕獲されたとすると, 電子エネルギー E_A は水素様イオンに対する公式を用いて,

$$E_A(R) = -\frac{Z_A^2}{2n^2} - \frac{Z_B}{R} \quad (2.15)$$

で与えられる. 反応が起こる条件は,

$$E_B(R) = -E_A(R) \geq V_{sp}(R) \quad (2.16)$$

であるから, この条件を満たす主量子数 n と核間距離 R_n は次式で与えられる.

$$n \leq \left\{ \frac{Z_B + 2\sqrt{Z_A Z_B}}{2I_B(Z_A + 2\sqrt{Z_A Z_B})} \right\}^{\frac{1}{2}} Z_A = \left(\frac{Z_B + 2\sqrt{Z_A Z_B}}{Z_A + 2\sqrt{Z_A Z_B}} \right)^{\frac{1}{2}} \frac{Z_A}{Z_B} \quad (2.17)$$

$$R_n(R) = \frac{2(Z_A - Z_B)n^2}{Z_A^2 - Z_B^2 n^2} = \frac{2(Z_A - Z_B)}{\frac{Z_A^2}{n^2} - Z_B^2} \quad (2.18)$$

直線軌道を仮定すると、電荷移行断面積は最大の $n(= n_p)$ に対応する半径 R_{n_p} の円の幾何学的な面積と反応確率 W の積として求められる。

$$\sigma = \pi R_{n_p}^2 W \quad (2.19)$$

Ryufuku et al. は $W = 1/2$ と近似しているが、多価イオン衝突 ($Z_A \gg Z_B$) の場合には $W \sim 1$ と考えることも出来る。ここまでの議論で分かる様に、このモデルには衝突速度に依存する部分が全くない。電荷移行断面積は衝突速度 $v = 1 \text{ au}$ 以下ではほぼ一定の値を取り、それ以上の高速度領域では徐々に減少することが知られているが、COBM による断面積はこの一定値に対応すると考えることが出来る。

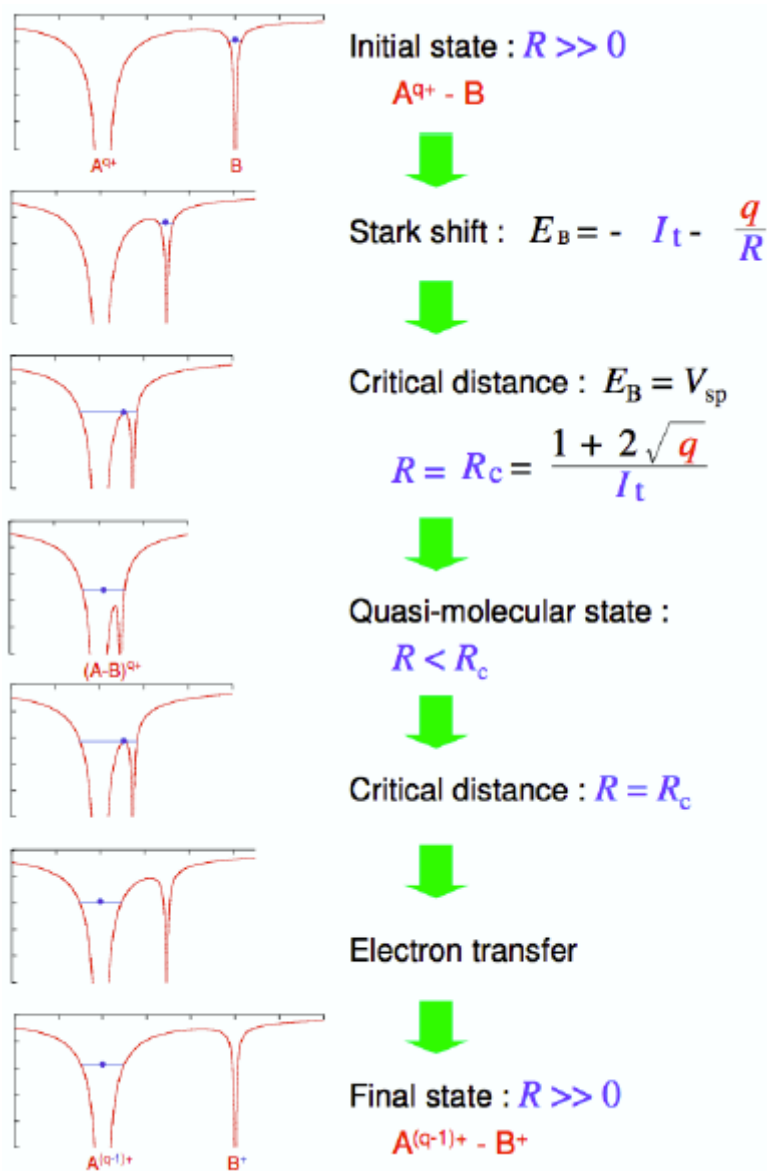


図 2.3: COBM における 1 電子捕獲過程

多電子系モデル

衝突前の中性原子において、外側から数えて t 番目の電子に対して $(t+1)$ 番以上の電子は核の電荷を最大限遮蔽し、外側に存在する $(t-1)$ 番以下の電子は全く遮蔽には寄与しないとすると、有効電荷は $+t$ に等しいと考えられる。この様な扱い方をすれば、 $+q$ 価の多価イオンの有効核電荷は外殻に電子が捕獲された場合にも $+q$ のままである。有効核電荷に対するこの様な考え方が、A. Bárány *et al.* のモデルと Niehaus のモデルの大きな相違点である。

衝突の前半(way in) では、 t 番目の電子にとってのポテンシャル鞍点の位置 $x_{sp}^{in}(R)$ と高さ $V_{sp}^{in}(R)$ 、ポテンシャル障壁と電子エネルギーが一致する核間距離 $R_t^{in}(R)$ 及びそのエネルギー値 $E_t^{in}(R)$ は次の様に与えられる。

$$x_{sp}^{in}(R) = \left(1 + \sqrt{\frac{t}{q}}\right)^{-1} R = \alpha_t R \quad (2.20)$$

$$V_{sp}^{in}(R) = -\frac{1}{R}(\sqrt{q} + \sqrt{t})^2 = -\frac{q}{\alpha_t^2 R} \quad (2.21)$$

$$R_t^{in} = \frac{t + 2\sqrt{qt}}{I_t} = \left\{q\left(\frac{1}{\alpha_t} - 1\right) + \frac{t}{1 - \alpha_t}\right\} \frac{1}{I_t} \quad (2.22)$$

$$E_t^{in} = \frac{(\sqrt{q} + \sqrt{t})^2}{t + 2\sqrt{qt}} I_t = -\frac{q}{\alpha_t^2 R_t^{in}} \quad (2.23)$$

式(2.22) から分かる様に, 衝突の前半ではの小さな順番に大きな核間距離で準分子状態に移行していく. A. Bárány *et al.*のモデルでは準分子軌道に入った電子は必ず多価イオンに捕獲されると考えるが, Niehaus のモデルでは次に述べる様に衝突の後半(way out) における標的原子への再捕獲(re-capture) 過程も考慮する.

衝突の後半では核間距離が徐々に大きくなり, t の大きな順番に準分子軌道から原子軌道へ戻て行く. t 番目の電子に対するポテンシャル障壁の高さは $(t+1), \dots, N$ の $(N-t)$ 個の電子の内, 入射イオンに捕獲された電子の数 n_t に依存する. 即ち, 入射イオンと標的原子の有効核電荷をそれぞれ $q - n_t$ と $t + n_t$ で表すことが出来る. 従って, t 番目の電子に対するポテンシャル障壁について次式が成り立つ.

$$x_{sp}^{out}(R) = \left(1 + \sqrt{\frac{t + r_t}{q - r_t}}\right)^{-1} R = \beta_t R \quad (2.24)$$

$$V_{sp}^{out}(R) = -\frac{1}{R}(\sqrt{q - r_t} + \sqrt{t - r_t})^2 = -\frac{q - r_t}{\beta_t^2 R} \quad (2.25)$$

ポテンシャル障壁の高さが E_t^{in} に一致する位置で, t 番目の電子が入射イオンに捕獲されるか標的に戻るかの分岐が起こると考える. その核間距離 R_t^{out} 及びエネルギー値 E_t^{out} は,

$$R_{t,r_t}^{\text{out}} = \left(\frac{q - r_t}{\beta_t} + \frac{t + r_t}{1 - \beta_t} \right) \left(I_t + \frac{q}{R_t^{\text{in}}} \right)^{-1} \quad (2.26)$$

$$E_{t,r_t}^{\text{out}} = -I_t - \frac{q}{R_t^{\text{in}}} = -\frac{1}{R_{t,r_t}^{\text{out}}} \left(\frac{q - r_t}{\beta_t} + \frac{t + r_t}{1 - \beta_t} \right)^{-1} \quad (2.27)$$

となる。 R_t^{in} で準分子軌道に入った電子が R_{t,r_t}^{out} でどちらかの原子に束縛されるので、その瞬間における相手イオンによる Stark シフトを考慮すると、核間距離が無限大になった時のエネルギーは次式で与えられる。

$$E_A(t, r_t) = -I_t - \frac{q}{R_t^{\text{in}}} \pm \frac{t + r_t}{R_{t,r_t}^{\text{out}}} = -\epsilon_A(t, r_t) \quad (2.28)$$

$$E_B(t, r_t) = -I_t - \frac{q}{R_t^{\text{in}}} \pm \frac{t - r_t}{R_{t,r_t}^{\text{out}}} = -\epsilon_B(t, r_t) \quad (2.29)$$

これらのエネルギー E_A , E_B は負の値を取り、その符号を変えたもの ϵ_A , ϵ_B が束縛エネルギーである。それぞれの束縛エネルギーに対応する主量子数は次の様に求める。多価イオンである A については $(q - r_t)$ 価の水素様イオンと考えて、

$$n_A \sim \frac{q - r_t}{\sqrt{2\epsilon_A(t, r_t)}} \quad (2.30)$$

としても悪くないとされている。一方、標的原子 B については量子欠損 d を用いて 1 電子原子近似からのずれを補正する必要がある。

$$n_B \sim \frac{t + r_t}{\sqrt{2\epsilon_B(t, r_t)}} - d(r_t) \quad (2.31)$$

$$d(r_t) = \frac{t + r_t}{\sqrt{2I_{t+r_t}}} - n_B^o \quad (2.32)$$

但し、 I_{t+r_t} は標的原子 B の $(t + r_t)$ 番目のイオン化エネルギー、 n_B^o は外殻軌道の主量子数である。

捕獲主量子数

Niehaus のモデルに従って $t = 1, r_t = 0$ に対する n_A , 即ち q 価の多価イオンに $t = 1$ の電子だけが捕獲される時に最も移行し易い原子軌道の主量子数 n_1 は次式の様になる.

$$n_1 \sim n_A(t = 1, r_t = 0) = \left\{ \frac{1 + 2\sqrt{q}}{2I_t(q + 2\sqrt{q})} \right\}^{\frac{1}{2}} q \quad (2.33)$$

ここで I_t は原子単位で表した標的原子の第 t イオン化エネルギーである. この式は水素様原子については $I_1 = Z_B^2/2$ であることを考慮すると, Ryuhoku et al. のモデルにおける結果と完全に一致している. また, $t \geq 2$ の電子に対しても $r_t = 0$ の場合は“ t より外側の原子は多価イオンの $+q$ 価の電荷を遮蔽しない”, “ t の電子に対する標的原子の有効電荷は $+t$ である” と考える Niehaus のモデルでは, $R_t^{in} = R_{t,r_t=0}^{out} = 0$ となり, 最も移行し易い主量子数 n_t は次式で与えられる.

$$n_1 \sim n_A(t, r_t = 0) \sim \left\{ \frac{t + 2\sqrt{qt}}{2I_t(q + 2\sqrt{qt})} \right\}^{\frac{1}{2}} q \quad (2.34)$$

但し, I_t は標的原子の t 番目のイオン化エネルギーである. 2 電子以上が移行する場合には $r_t \geq 0$ となるが, n_t にする対する式は次式の様に表すことが出来る.

$$n_1 \sim n_A(t, r_t) \sim \left[\frac{(t + 2\sqrt{qt})\{q + t + 2\sqrt{(q - r_t)(t + r_t)}\}}{2I_t(q + t + 2\sqrt{qt})\{q - t + 2\sqrt{(q - r_t)(t + r_t)}\}} \right]^{\frac{1}{2}} (q - r_t) \quad (2.35)$$

この式は $r_t = 0$ とすると式(2.34) と一致し, 更に $t = 1$ とすると式(2.33) と一致することが分かる. 二電子移行過程入射イオンの二電子移行後の状態は, 捕獲電子が2つとも等しい主量子数に捕獲されている状態 (symmetric state) と, 異なった主量子数に捕獲されている状態 (asymmetric state) がある. symmetric state はオージェ過程によって脱励起 (TI) しやすく, asymmetric state は光放出によって脱励起 (TDC) しやすい. 前者は逐次的に一電子ずつ移行する過程によって生じやすいが, 後者の生成にはいくつかの生成過程が考えられる.

(1) Correlated Transfer Excitation (CTE) … 逐次的に電子が移行する際に, 後から捕獲された電子が先に捕獲された電子に相関を及ぼし, 二番目の電子の捕獲と同時にさらなる励起がおこる過程

(2) Correlated Double Capture (CDC) … 二電子が相関を及ぼしながら同時に二電子を捕獲する

過程

(3) Auto Transfer to Rydberg states (ATR)・・・衝突の後のある核間距離で縮退している symmetric state と asymmetric state が、核間距離が離れたときに縮退が解け、配置間相互作用で混合していた asymmetric state ができる過程

Two-Centre Atomic Orbital Close-Coupling Meghod, TC-AOCC 法

理論計算の手法の一つであり[26], 2 中心原子軌道緊密結合法と呼ばれる. 標的および入射イオンと電子の相互作用を記述するハミルトニアンにポテンシャル $V_{A,B}(r_{A,B})$ を用いると, シュレディンガー方程式は以下のように書ける.

$$\left(H - i \frac{\partial}{\partial t}\right) \Psi = 0 \quad (2.36)$$

$$H = -\frac{1}{2} \nabla_r^2 + V_A(r_A) + V_B(r_B) \quad (2.37)$$

原子軌道中における電子状態を記述する波動関数 $\phi_{nlm}(\vec{r})$ は,

$$\phi_{nlm}(\vec{r}) = \sum_i c_{nk} \chi_{klm}(\vec{r}) \quad (2.38)$$

と書くことができる. このとき χ_{klm} は基底関数である. 以上からある衝突系での波動関数 $\Psi(\vec{r}, t)$ は,

$$\Psi(\vec{r}, t) = \sum_i a_i(t) \phi_i^A(\vec{r}, t) + \sum_i b_i(t) \phi_i^B(\vec{r}, t) \quad (2.39)$$

となる. ここで, 原子軌道上電子の波動関数の振幅 $a_i(t)$ と $b_j(t)$ に関する 1 次結合方程式は,

$$i(\dot{A} + S\dot{B}) = HA + KB \quad (2.40)$$

$$i(\dot{B} + S^\dagger \dot{A}) = \bar{K}A + \bar{H}B \quad (2.41)$$

となる. A と B は振幅 $a_i(t)$ と $b_j(t)$ のベクトル, S は overlap matrix, H は direct coupling matrix, K は exchange matrix といわれる行列である. 上記の方程式は初期条件 $a_i(-\infty) = \delta_i$, $b_j(-\infty) =$

0 のもので有限の核間距離から解き始めることにより, 次式で電荷移行断面積を導出することができる.

$$\sigma_j = 2\pi \int_0^\infty |b_j(+\infty)^2 b db| \quad (2.42)$$

b は衝突係数である. AOCC 法では電荷交換反応時に生成される準分子状態を仮定していない. 準分子状態まで含めた理論計算には Molecular Orbital Close Coupling method(MOCC 法) がある. AOCC 法では衝突エネルギーが 1 keV 以上の領域で実験結果を再現することが知られており, MOCC 法では衝突エネルギーの低い 1 keV 以下の領域で実験値を良く再現する.

遷移

L - S 結合において 4 つの量子数で表された 2 つの電子状態, $LSJM_J - L'S'J'M_J'$ 間の電気双極子遷移(electric dipole transition) に関する選択則(selection rule) は次式の様になる.

1. $\Delta S = 0$
2. $\Delta L = 0, \pm 1$ (但し, $L + L' \geq 1$)
3. $\Delta J = 0, \pm 1$ (但し, $L + J' \geq 1$)
4. $\Delta M_J = 0, \pm 1$
5. odd parity \leftrightarrow even parity

これら 5 つの条件が全て満たされた時, 許容遷移(allowed transition) となる. 尚, $L + L' \geq 1$ という表現は” $L = L' = 0$ の時は $\Delta L = 0$ の条件を満たしていても禁制遷移(forbidden transition)” ということを表している.

A 係数自然放出(spontaneous emission) の遷移確率(transition propability) は Einstein の A 係数(Einstein's A coefficient) で表される. A 係数は単位時間当たりの遷移数(transition rate)であるので, 単位は“ s^{-1} ” となる. 電気双極子遷移を仮定した場合, 始状態 $i = |\gamma J\rangle$ から終状態 $f = |\gamma' J'\rangle$ への遷移に対する A 係数は次式で与えられる:

$$A_{fi} = \frac{4}{3\hbar c^3} \frac{e^2}{4\pi\epsilon_0} \frac{\omega_{fi}^3}{2J+1} \sum_{M_J', M_J} |\langle \gamma' J' M_J' | \mathbf{r} | \gamma J M_J \rangle|^2 \quad (2.44)$$

$$= \frac{4\alpha}{3c^2} \frac{\omega_{fi}^3}{2J+1} |\langle \gamma' J' | \mathbf{r} | \gamma J \rangle|^2 \quad (2.45)$$

式(2.44) より, 光学許容(optical allowed) 遷移の A 係数は準位間のエネルギー差に対応する角振動数 $\omega_{fi} = |E_f - E_i|/\hbar$ の 3 乗に比例するので, エネルギー差が大きい程遷移が起こり易いことが分かる. 一般的には軽元素では L-S 結合による状態の記述が行われるが, 重元素では j-j 結

合で考えるのが適当である。

カスケード

前述の様に遷移確率はエネルギー差の大きい準位間程遷移が起き易いが、勿論選択則に従えばエネルギー差が小さい準位間の遷移を経て安定なエネルギー準位へ落ち着く遷移過程もある。小さな滝を幾つも経て低い状態へ落ちて行く様なこの過程を、カスケード(cascade) 過程と言う。

イラスト線

式(2.43) 及び図 2.4 から分かる様に、 $l = n-1$ となる準位は $\Delta n = -1, \Delta l = -1$ という準位にしか遷移することが出来ない。このような準位をイラスト準位(yrast level) と呼び、これらを結んだ線をイラスト線(yrast line) と呼ぶ。

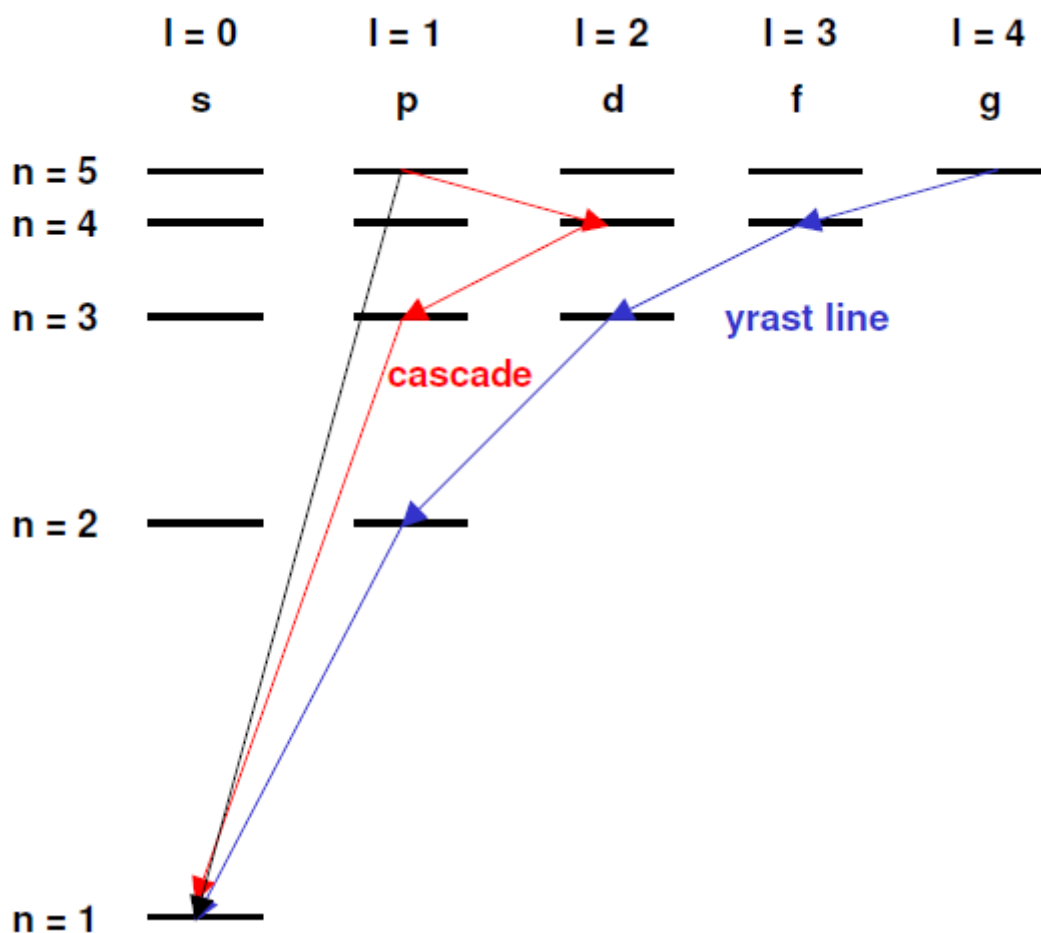


図 2.4: カスケード, イラスト線の遷移例

第 3 章 実験方法

この章では本研究で用いた実験装置や測定方法について説明する.

3.1 実験装置

3.1.1 ECRIS

本研究では多価イオン生成に首都大学東京(TokyoMetropolitanUniversity)に設置されている ECRIS を用いた[27]. ECRIS の断面図を図 3.1, 主なパラメータを 表 3.1 に示す.

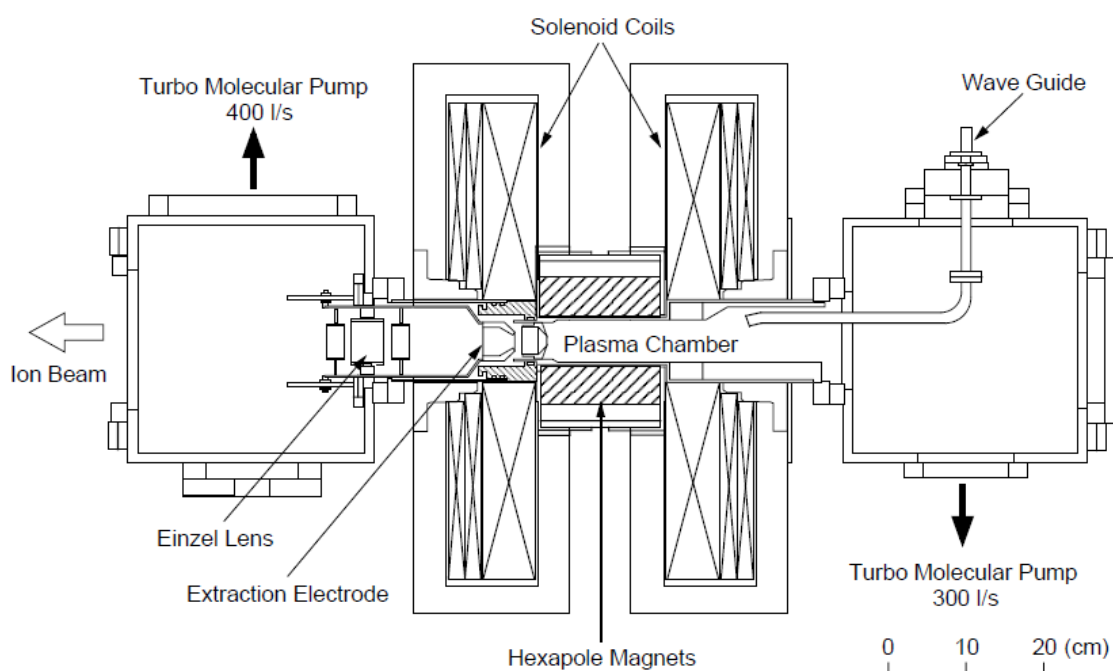


図 3.1 ECR イオン源の断面図

この ECRIS は平成 5 年に文部省科学研究費補助金特別研究「多価イオン原子物理学」によって設置された装置であり, 本学の原子物理実験研究室と反応物理化学研究室が共同で使用する.

プラズマチェンバー	材質	Cu
	直径	50 mm
	長さ	190 mm
永久磁石	極数	6 極
	材質	Nd-Fe-B
	磁場強度	～ 1.0 T(表面)
マイクロ波	波長	14.25 GHz
	最大出力	500W
最大引き出し電圧		20kV
圧力	非実験時	～ 5×10^{-7} Pa
	実験時	～ 2×10^{-6} Pa

表 3.1 TMU ECRIS の主なパラメーター

多価 C,N,O イオン生成 本研究で使用した ^{13}C , ^{14}N , ^{16}O , ^{18}O の多価イオンはそれぞれ, CH_4 , $^{13}\text{CO}_2$, N_2 , O_2 , C^{18}O ガスを ECRIS のガス導入系よりイオン源内部へ供給することで生成した. 典型的な多価イオンビーム強度は 1-100nA 程度であった. 図 3.2 に O_2 ガスを導入した際の質量スペクトルを示す. 横軸は価数選別用電磁石の電流値, 縦軸はイオン強度である.

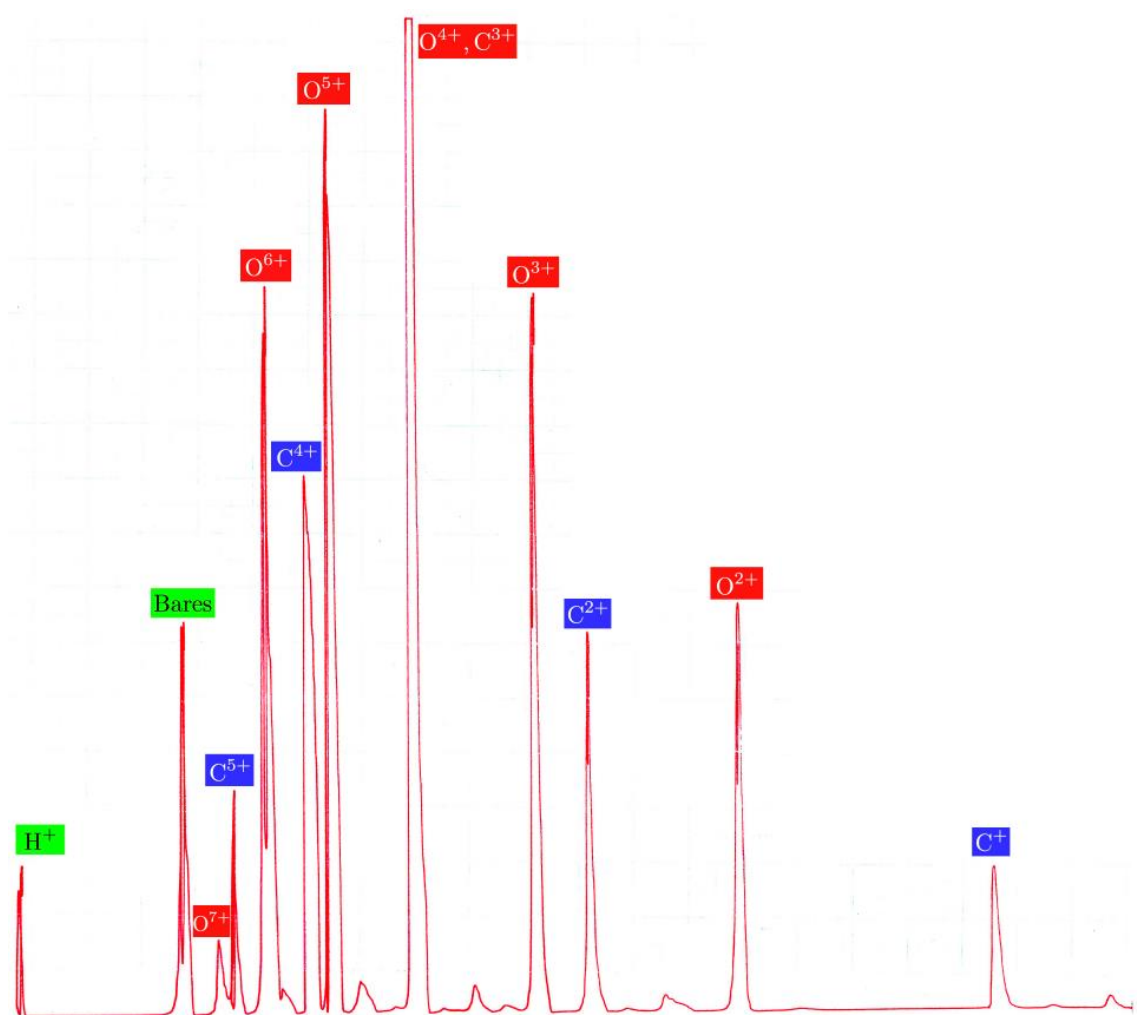


図 3.2 O_2 ガス導入時の質量スペクトル

3.1.2 ビームライン

実験室のビームライン全体の概略図を図 3.3 に示す. 実験用には 4 つのポートがあり, そのうち現在は 2 つのポートが実験に使用されている. このビームラインでは原子物理実験研究室が行っている電荷交換反応の他に, 反応物理化学研究室が Ar の多価イオンを CO_2 , OCN , C_2H_2 分子に衝突させてクーロン爆発後の分子の解離パターンを観測する実験を行っている.

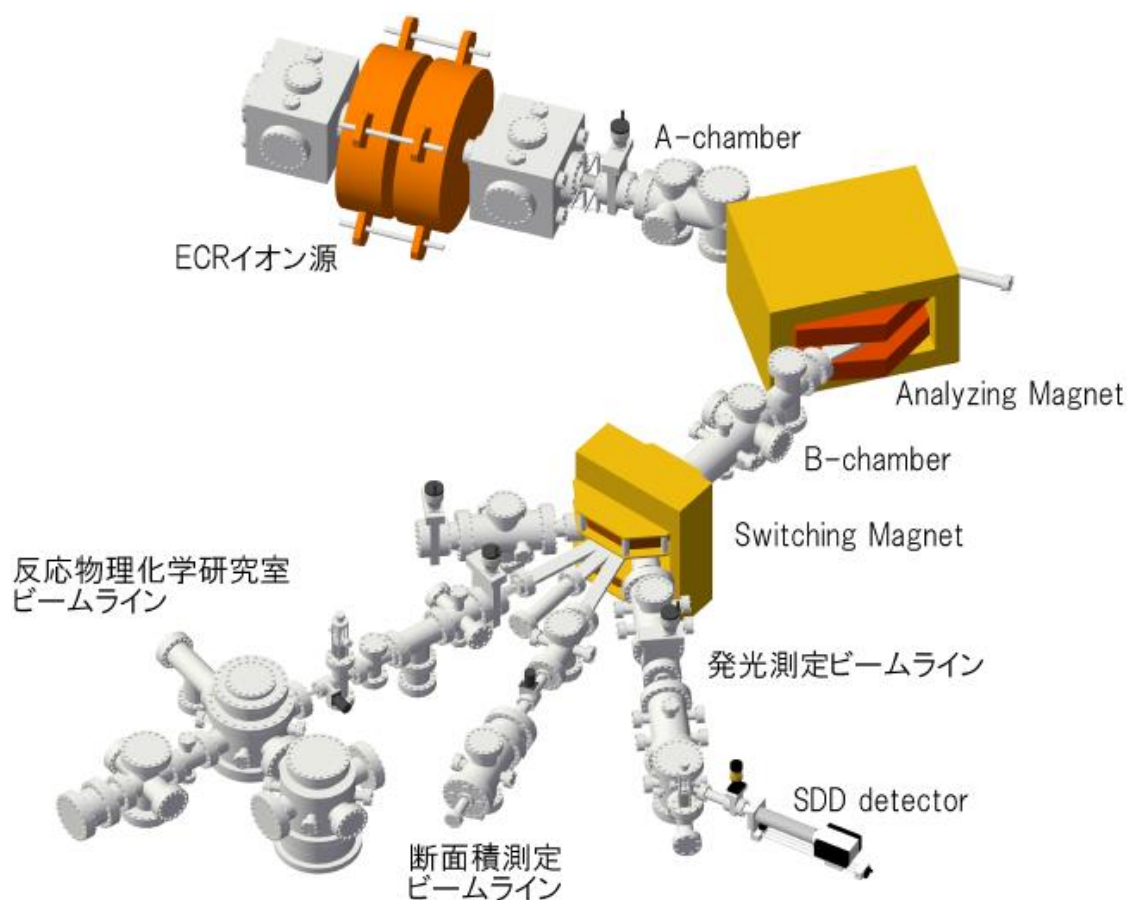


図 3.3 首都大学東京に設置されているビームライン全体の概略図

ECR イオン源で生成した多価イオンはプラズマチェンバーに正の高圧を印加することにより引き出される。イオンを効率よくプラズマ中から引き出すため、3つの電極を使用してイオンビームの引き出しを行っている。引き出しレンズの断面図を図 3.4 に示す。本研究対象である太陽風の中でも、とりわけ低速のものは 1 kV/q 以下のエネルギーを持っている。衝突領域で太陽風速度へ効率よく減速するためには、イオン源からビームを引き出す段階において 5 kV 以下の低い電圧でイオンを引き出すことが必要である。 5 kV では $10\text{--}20 \text{ kV}$ に比べてイオンビームの引き出し効率が悪いので、十分なビーム強度を得ることができない。そこで、1番手前の電極に負の電圧をかけることでポテンシャルを下げ、2番目、3番目の電極でビームを絞ることによりビーム引き出しの効率を上げる工夫を行っている。図 3.5 に、SIMIONを用いたイオンビーム引き出しのシミュレーション結果を示す。プラズマチェンバーからビーム状に引き出された多価イオンは価数選別用電磁石によって特定の質量電荷比を持ったイオンに選別される。B チェンバー内はイオンビームをパルス化する為の高速ディフレッタ、調節可能な上下・左右2組のスリット、アインツェルレンズおよび四重極レンズが設置されている。そして、その後段の切り替え用電磁石によって各実験ビームラインへイオンビームを導く。切り替え用電磁石と衝突チェンバーの間にはアインツェルレンズが設置

されている。これらを用いてチェンバーの中心を通る平行ビームを衝突チェンバーへと導くことが可能となっている。また、切り替え用電磁石の直後にはファラデーカップが設置されており、イオンビームの調整時に使用している。非実験時のビームライン全体の真空度は $10^{-7} - 10^{-6}$ Pa 程度に保たれている。

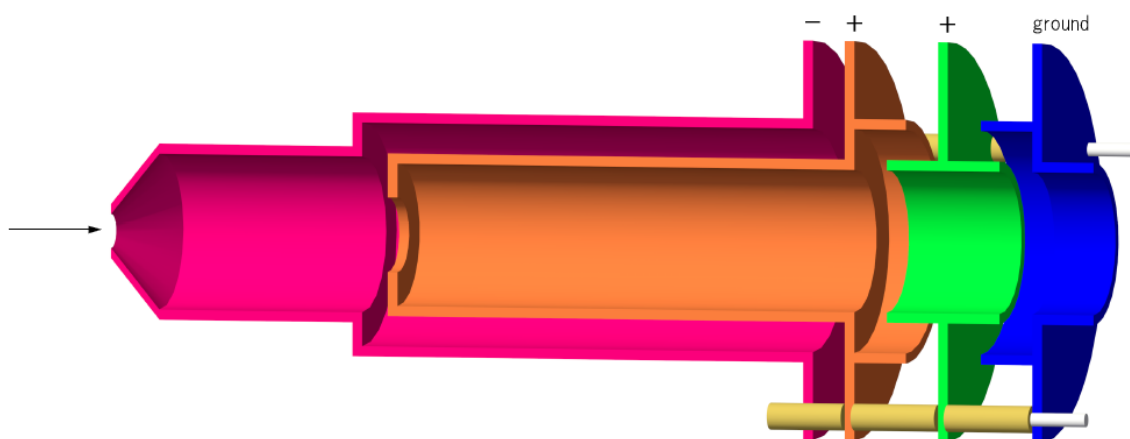


図 3.4 引き出しレンズの断面図

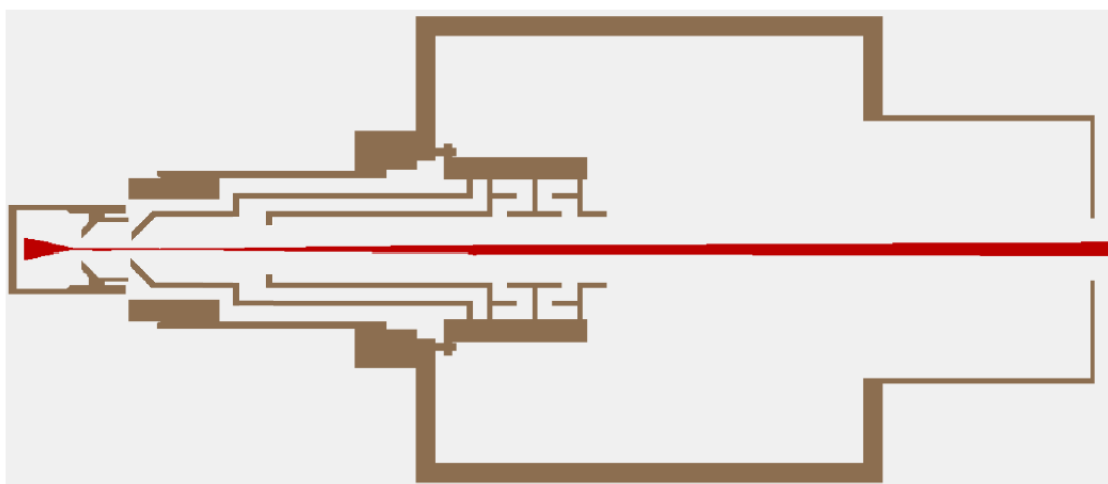


図 3.5 SIMION によるイオン引き出しのシミュレーション

3.1.3 斜入射分光器

電荷交換反応によって発生する EUV(Extreme Ultra-Violet) 領域の輝線を観測するため、斜入射分光器 [28] を用いて分光観測を行った。斜入射分光器は集光のためのシリンドリカルミラー、スリット、回折格子、CCD 検出器から構成されている。分光器の設計図、実際の写真を図 3.6, 3.7

に示す.

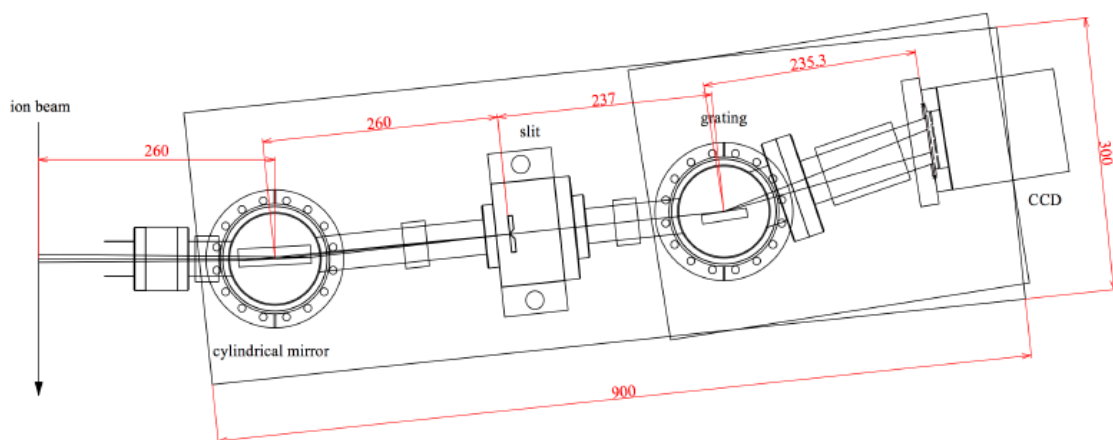


図 3.6 斜入射分光器の設計図

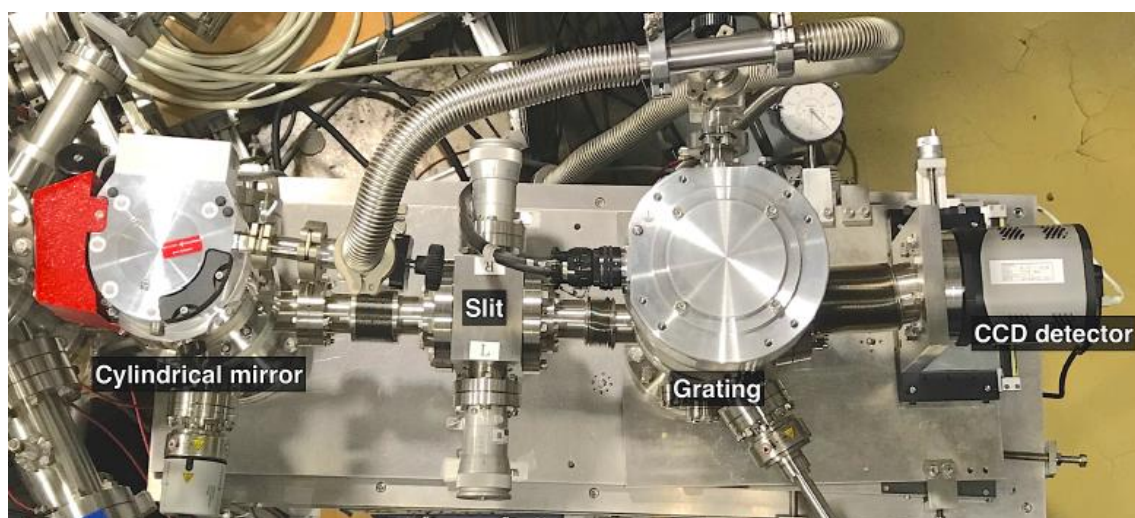


図 3.7 斜入射分光器

この斜入射分光器は多価イオンからの微弱な発光をシリンジカルミラーによってスリット位置に集光し、平面結像型凹面回折格子により波長分別を行い、電子冷却式背面照射型 CCD で検出を行っている。回折格子は中心部溝本数が 1200 本/mm のものを波長領域(5~20nm)用のものを使用した。また、斜入射分光器全体の波長分解能は約 $0.076\text{nm}@22.7\text{nm}$ であった。

ミラー

この斜入射分光器では、イオンからの発光の集光にシリンジカルミラーを使用している。シリンジカルミラーの詳細と実際の写真を表 3.2、図 3.8 に示す。

表 3.2 シリンジカルミラーの詳細

幅 / mm ²	厚さ / mm	曲率半径 / mm	表面粗さ / nm	材質	ミラー面
80 × 40	20 mm	13.6	0.5~1	SiO ₂	Au



図 3.8 シリンダリカルミラーの写真

また、ミラーは XYZ 軸フラットステンレスステージ, θ 軸粗微動ステンレスステージ, α 軸小型ステンレスゴニオステージによる 5 軸調整が可能となっている。ゴニオメータの写真 を図 3.9 に示す。

回折格子

斜入射分光器で使用している回折格子は島津製作所社製の平面結像型凹面不等間隔回折格子[29]である。これは、ラミナー形状による高次光の少なさ、ホログラフィック法による迷光の少なさ、さらに、非球面波露光法による収差補正機能での高分解能を備えた回折格子である。また、回折格子の溝が不等間隔になっており、CCD 検出器面上に平面結像をする仕組みとなっている。回折格子の光学配置、マウントパラメータを図 3.10、表 3.3 にそれぞれ示す。本研究室には表 3.3 に示す 2 つの回折格子があるが、本研究においては特に極端紫外 (Extreme Ultra Violet ;EUV)領域の輝線を観測するため、中心部溝本数が 1200 本/mm のものを使用した。

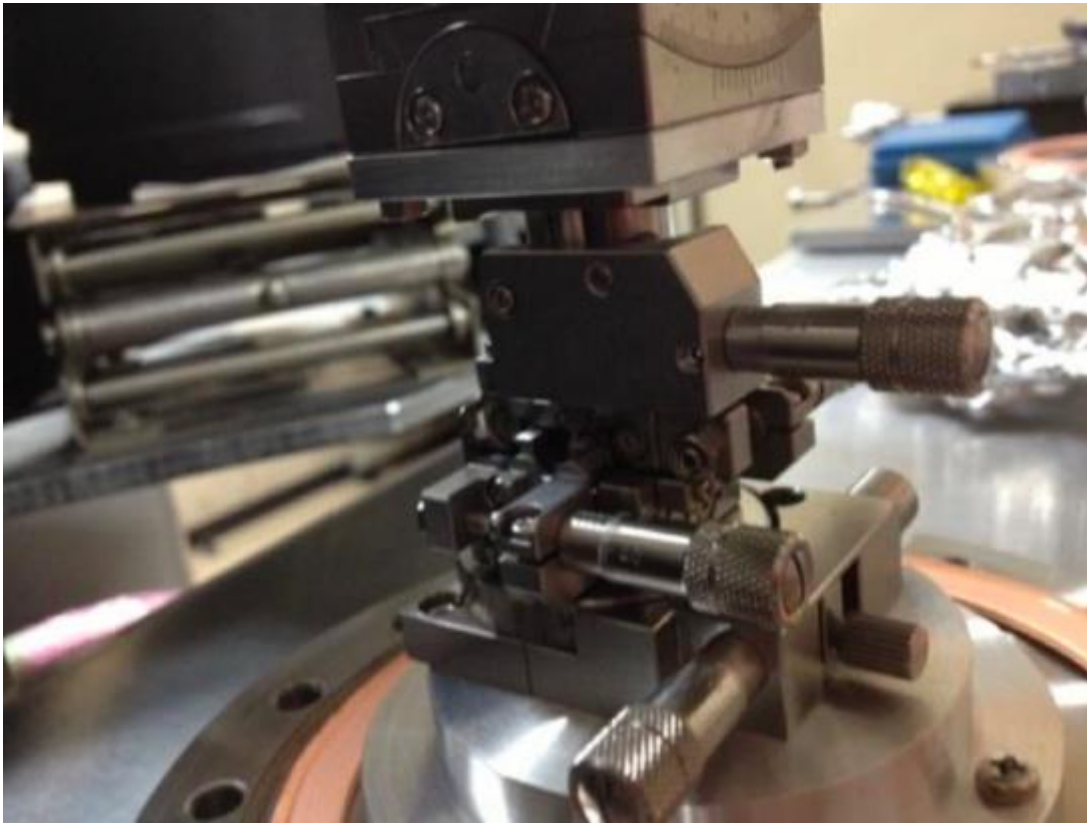


図 3.9 ゴニオメータの写真

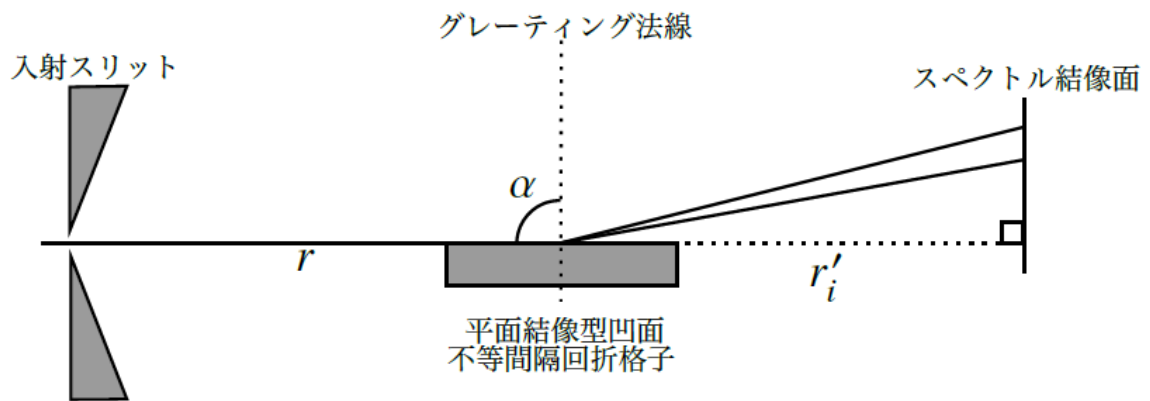


図 3.10 回折格子の光学配置

中心部溝本数 / 本数/mm	波長範囲 λ / nm	r_i / mm	α / mm	r_i' / mm
1200	5~20	237	87	235

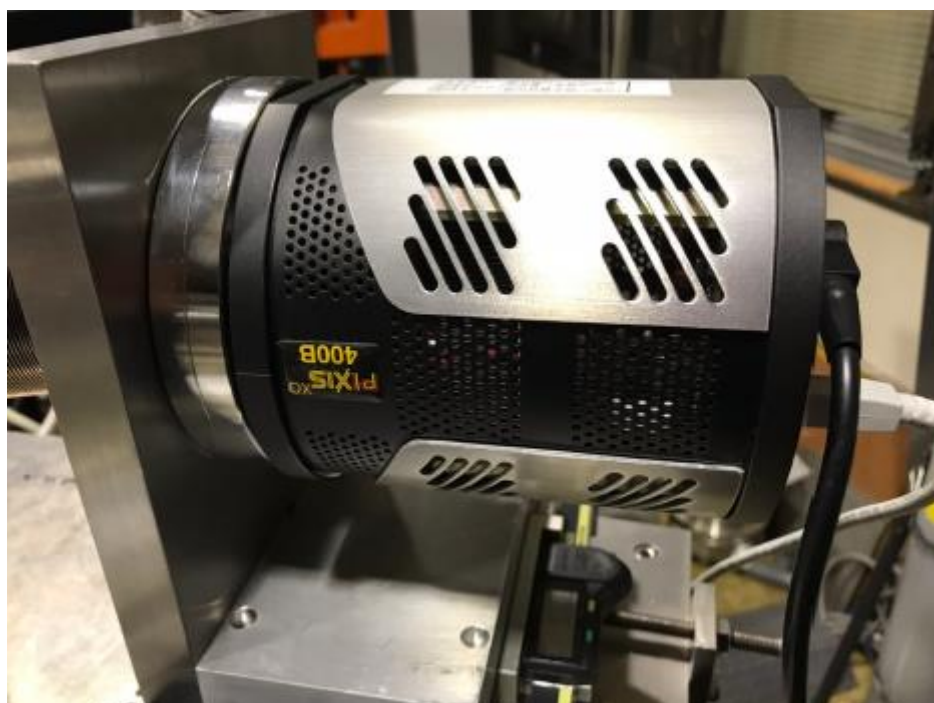
表 3.3 回折格子の主なマウントパラメータ

CCD 検出器

斜入射分光器では, Princeton Instruments 社の電子冷却型の背面照射 CCD PIXIS-XO: 400B を用いている. これは電子冷却により-70 °C まで冷却することによって暗電流を落とし, 微弱光を検出する. 典型的な暗電流の値は-75 °C で 0.001 e-/p/sec となっている. なお, 本研究では冷却温度は-70°C とした. CCD 検出器の 1 ピクセルのサイズは 20 μm であり, 縦 400×横 1340 ピクセルとなっている. また, 本研究で用いた CCD はリニアステージ上に設置されており, 結像面で可動であるため, 観測する波長領域を変更することが可能である. 波長較正によって得られた CCD 検出器の各位置における観測波長領域を表 3.4 に示す. なお, CCD 検出器の位置のゼロ点はリニアステージに印字されている目盛りの中心とした. CCD 検出器, 及びリニアステージの写真を図 3.11, 3.12 にそれぞれ示す.

CCD 検出器の位置 / mm	最短検出波長 / nm	最長検出波長 / nm
-14.00	1.0400	13.726
+2.00	7.3239	25.754
+9.00	11.248	31.965

表 3.4 CCD 検出器の位置に対する観測波長領域



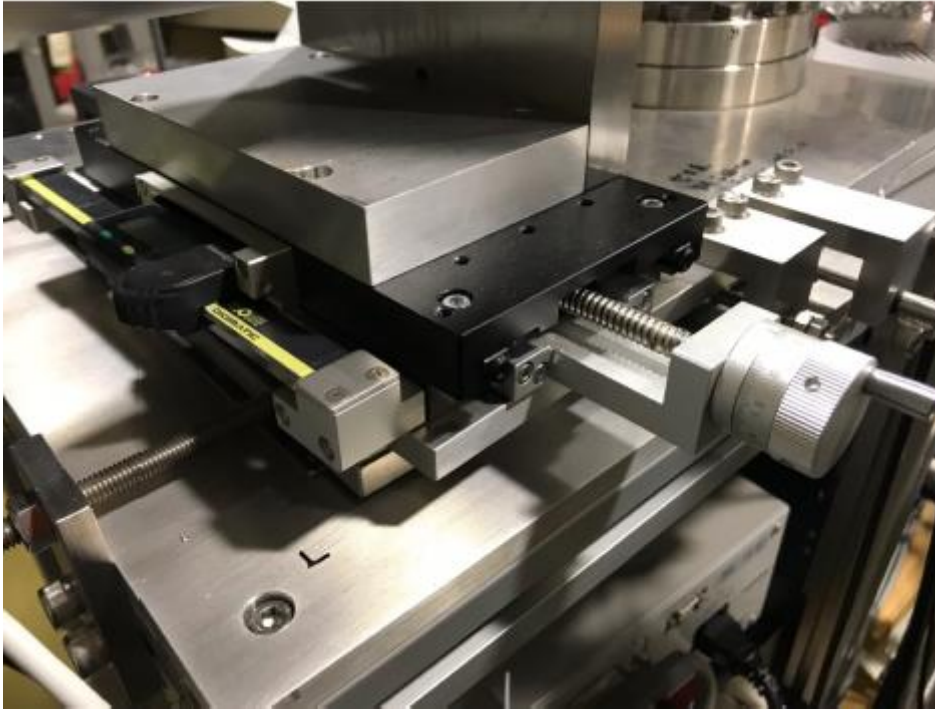


図 3.11 CCD 検出器の写真 図 3.12 リニアステージの写真

3.2 測定方法

ここでは、実験における発光スペクトル観測の手法について説明する。

3.2.1 magic angle

magic angle 方向から観測することで、励起状態からの発光強度分布を、偏光度に依存することなく測定することができる[30,31].

$$I(\theta) = \frac{\sigma}{4\pi} [1 + \alpha_2 A_{20} P_2(\cos \theta)] \quad (3.1)$$

ここで、 $I(\theta)$ は発光強度、 α_2 は角運動量に依存するパラメータ、 A_{20} は偏光度に依存するパラメータ、 $P_2(\cos \theta)$ は Legendre 多項式である。ここで、偏光度に依存しない測定のため、偏光度に依存するパラメータを 0 とすると、

$$P_2(\cos \theta) = 3\cos^2 \theta - 1 = 0 \quad (3.2)$$

となる。この式を θ について解けば、 $\theta = 54.736^\circ$ となる。

3.2.2 発光観測方法

ECRIS で生成された多価 C,N 及び O イオンを 15kV の電位差で引き出し, 分析用電磁石によって価数選別後, ポート選別用電磁石によって衝突チェンバーに導いた. 発光測定ビームラインを図 3.13 に示す.

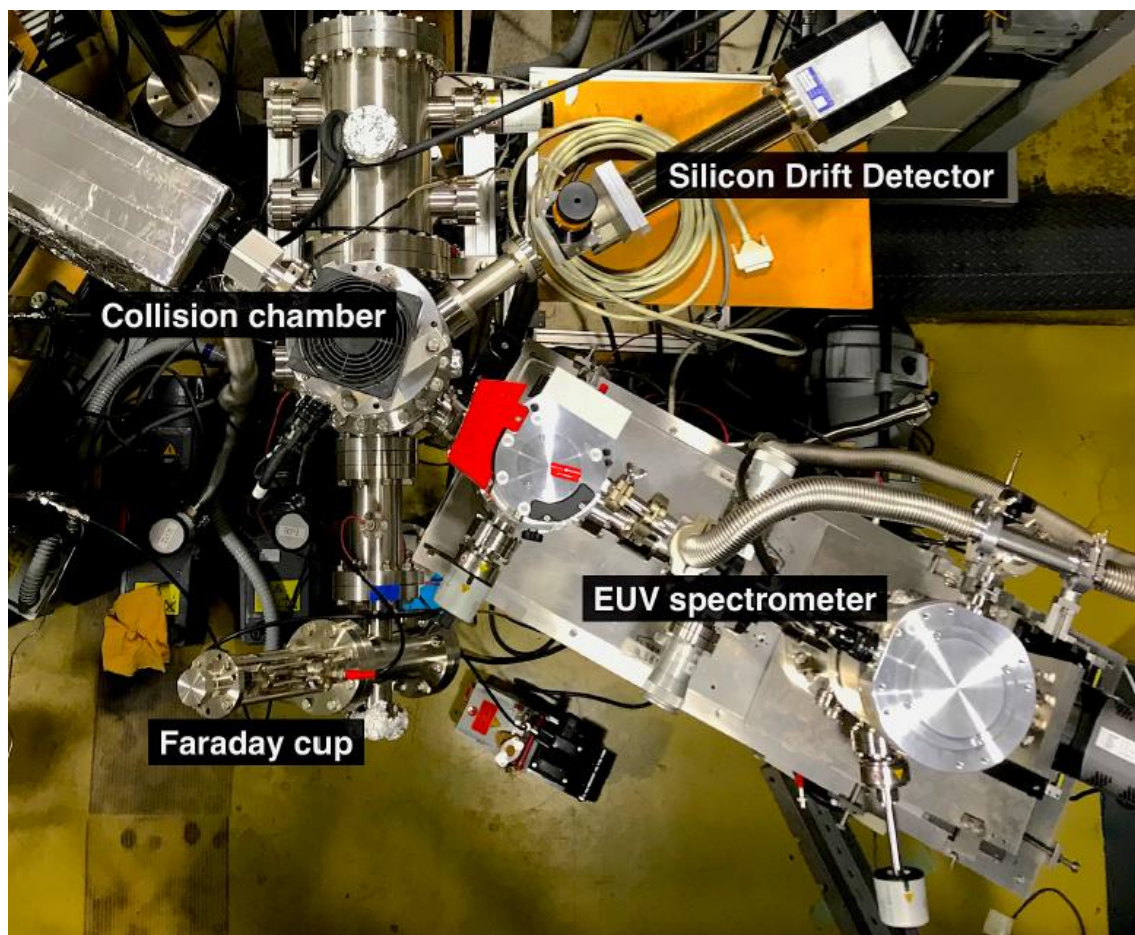


図 3.13 発光測定ビームライン

衝突セルにて電荷交換反応に伴い発生する輝線は, ビーム軸に対し magic angle(54.7°)方向から斜入射分光器を用いて観測した. ガスセルを抜けたビームは最下流に設置された可動式ファラデーカップへと到達する.

3.2.3 ビーム強度モニター

衝突実験チェンバーに導かれた多価イオンビームを最下流に設置された Faraday Cup によって検出し, $1\text{M}\Omega$ の抵抗を通してその電流値を電圧としてデジタルマルチメータ(FLUKE 製 189 TRUE RMS MULTIMETER)によって測定した. このデジタルマルチメータは, 測定中のイオン電

流の平均値が画面に表示されるので、その値を解析に用いた。

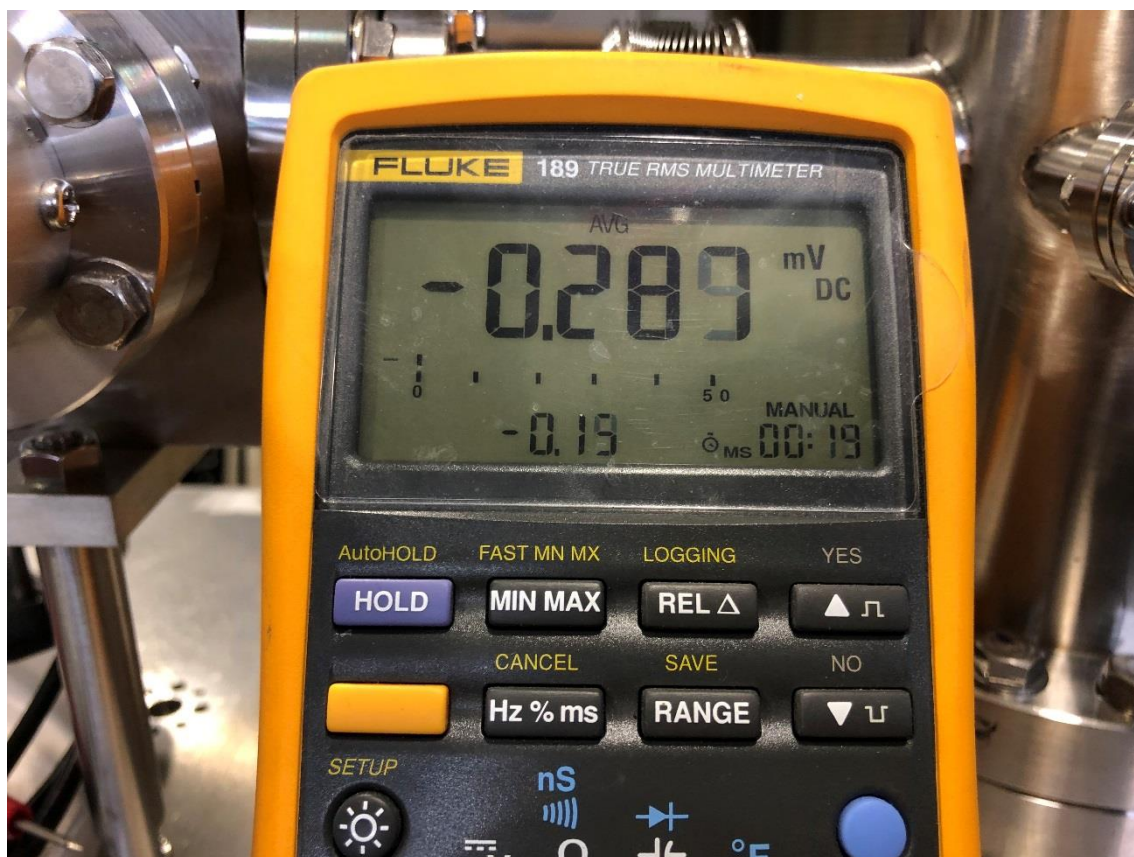


図 3.14 ビーム強度モニター

3.2.4 標的ガス圧力

本研究における計算，実験の対象は，一回衝突による一電子移行に伴う発光である．そのため，標的ガス圧力を一回衝突する条件に設定する必要がある．発光断面積測定用の衝突セルの長さは 50 mm である．入射イオンが標的ガスに対して十分に速いため，標的ガスは静止していると仮定する．平均自由行程 λ ，断面積 σ ，標的ガス数密度 n ，標的ガス圧力 P ，温度 T ，ボルツマン定数 k とすると，平均自由行程は，

$$\lambda = \frac{1}{\sigma n} \quad (3.3)$$

$$n = \frac{P}{kT} \quad (3.4)$$

で表される．この衝突領域長において一回衝突を満たす標的ガス圧力は， $T = 291 \text{ K}$ ， $\lambda = 50 \text{ mm}$ および断面積 $5 \times 10^{-15} \text{ cm}^2$ と仮定すると， $P \leq 1.6 \times 10^{-2} \text{ Pa}$ となる．本研究における実験では，二

回衝突が生じないような標的ガス圧力として $\leq 1.0 \times 10^{-2}$ Pa で実験を行った。

3.2.5 分光

電荷移行反応に伴う発光を前述の斜入射分光器によって分光し、コンピュータを用いて記録した。電荷交換反応による発光の分光は 1-2 時間の測定で行った。

発光スペクトル観測された CCD 検出像の一例を図 3.15 に示す。実際の解析ではこの CCD 検出像の光子カウントを縦方向に積分することでスペクトルを得ている。

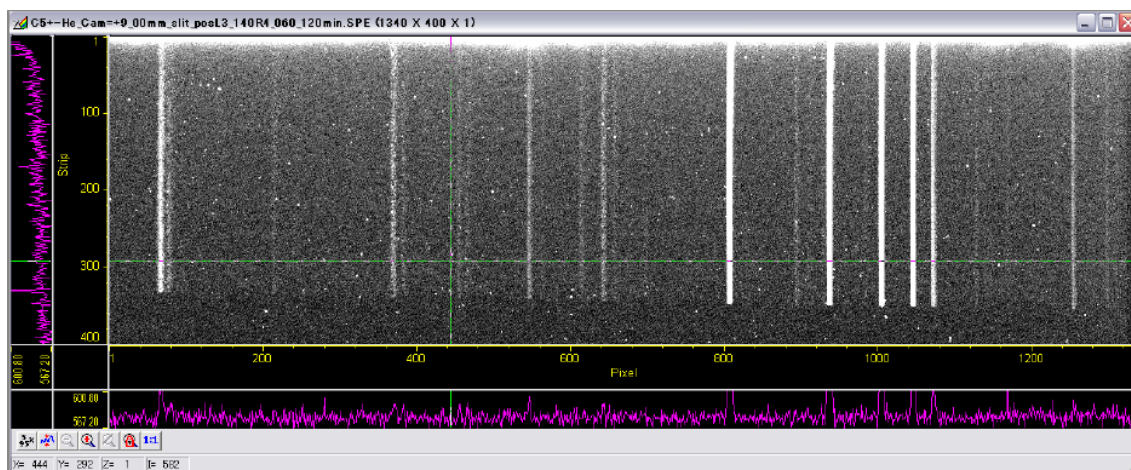


図 3.15 CCD 画像例

3.3 斜入射分光器の波長校正

横軸の波長校正は主に O^{6+} から放出される EUV 輝線を用いて行った。斜入射分光器に設置されているスリット, 回折格子, 及び CCD 検出器の間の幾何学的な概略図を以下の図 3.16 に示す。

この光学配置において, CCD のピクセルナンバーと波長の関係は以下の式で表される。

$$\lambda = \frac{d}{m} \left\{ \sin \alpha - \cos \left(\tan^{-1} \frac{l_p n_p + y}{b} \right) \right\} \quad (3.5)$$

(3.5) ここで, l_p は CCD の素子の幅, n_p はピクセルナンバー, d は回折格子に刻まれた溝の幅, m は回折光の次数である。波長校正は 4 つの CCD 検出器位置にて行い, それぞれリニアステージに示される値で -15.00mm, -14.00mm, +2.00mm, +9.00mm である。図 3.17 に O^{6+} O_2 における CCD 位置+9.00mm

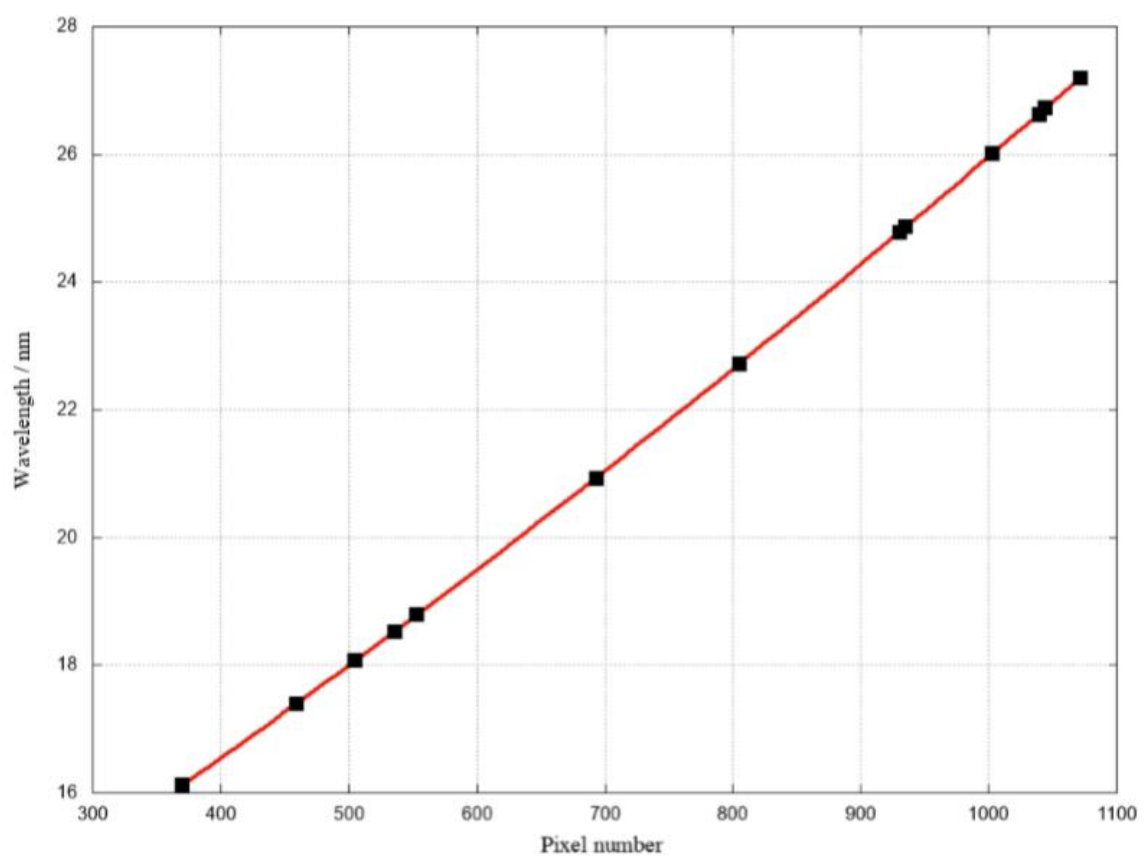


図 3.18 CCD 検出器位置+9.00mm におけるピクセルナンバーと波長の関係

第 4 章 シミュレーション手法

この章では、本研究において行った電荷交換衝突における励起状態占有数分布の時間発展 シミュレーションに関する概要とそのプログラムにおける実装について記述する。

4.1 概要

本研究室では ECR イオン源を用いた電荷交換衝突実験を行っている。電荷交換衝突実験における発光断面積測定では、多価イオンを標的ガスに衝突させることによって、多価イオンのある励起状態へ捕獲された電子が脱励起する際の光を観測している。我々の実験装置では標的気体で満たされた長さ 5cm の衝突セルの内部に多価イオンビームを通過させることで電荷交換衝突を実現している。また、発光観測領域は衝突セル中心に開けられた直径 2mm の穴であり、この部分から出てくる光を集光・分光することで観測している。多価イオンビームが通過している間、衝突セルの内部において多価イオンは電荷交換と脱励起を繰り返している。従って、発光観測領域での各励起状態がどのような分布で広がっているのかは自明ではない。この問題から、発光観測領域において放出されている真の発光スペクトルも同様に自明ではなくなるため、実験によって観測される発光スペクトルの検出器の装置関数による影響を正確に見積もることができなくなる。これは発光断面積の絶対値測定における障害となっている。そこで、衝突領域内部の励起状態占有数分布の時間発展を明らかにするため、多価イオンの電荷交換と脱励起を記述したレート方程式 (Rate Equation) を数値的に解き、そこから理論的に期待される発光スペクトルを計算した。

本研究ではこのシミュレーション手法を用いた計算を行い、実験で得られたスペクトルとの比較に用いた。

4.2 理論的発光断面積

レート方程式を数値計算によって解くことで、衝突セル内部における各状態 S の占有数分布の時間発展が $\rho(t, S)$ として得られる。この $\rho(t, S)$ を用いることで、衝突セル内部での励起状態占有数分布の時間発展を考慮に入れた理論的な発光断面積 $\sigma_{Em, Theo}(\lambda)$ を計算する。標的粒子で満たされた衝突セルを通過するイオンビームの、ある時間 t における理論的発光断面積 $\sigma_{Em, Theo}(t, \lambda)$ は、以下の式で表される。

$$\sigma_{Em, Theo}(t, \lambda) = \frac{\rho(t, S) \cdot A_{S, S'}}{N \cdot v} \quad (4.1)$$

ここで、 $A_{S, S'}$ は状態 S と S' の間の A 係数、 N は標的粒子数密度、 v はイオンビーム速度である。理論的発光断面積における輝線のエネルギー (もしくは波長) の計算は、式 4.1 に含まれる A 係数の示す 2 準位のエネルギーの差分を取ることで行う。そのため、各電子状態のエネルギーレベルの

情報が必要である. 各電子状態のエネルギーレベルは, A 係数の場合と同様に CHIANTI に格納されているエネルギーレベルデータを JavaScript Object Notation (JSON) に整形して使用している.

第 5 章 実験結果

この章では、本研究において行った炭素、窒素、酸素多価イオンの極端紫外領域発光観測実験の結果について記述する。本章には輝線が観測された CCD 検出器位置のスペクトルのみを記載している。以下の表 5.1 に、各実験共通のパラメータを示す。なお、実験ごとに異なるパラメータについては該当部分に適宜記載する。また、AOCC の計算は H_2 と He を標的としたものが得られているが、 H_2 標的より He 標的のほうが信頼できるので、実験は He 標的で行った。

パラメータ	値
イオン引き出し電圧	15-20kV
標的ガス圧力	$3.0 \times 10^{-3} - 2.0 \times 10^{-2} \text{Pa}$
CCD 露出露光時間	60-120min
斜入射分光器 入射スリット幅	hoge um

表 5.1 実験におけるパラメータ

5.1 裸イオン

この節では、裸の炭素、酸素イオンを入射イオンとした発光観測実験の結果について示す。また、この系の実験におけるイオンビーム電流 $I(\text{C}, \text{O}^{q+})$ を各図のキャプションに併せて示す。裸炭素イオンでは $\text{C}^{6+} - \text{He}$ の系において実験を行った。なお、ECR イオン源を用いた C^{6+} の生成においては、導入ガスには $^{13}\text{CO}_2$ を使用した。これは、 ^{12}C では質量電荷比が $^{14}\text{N}^{7+}$ や $^{16}\text{O}^{8+}$ と等しくなってしまう、価数選別磁石で炭素の裸イオンのみを取り出すことができないためである。

$\text{C}^{6+} - \text{He}$ の測定結果を図 5.1, 図 5.2 に示す。

$\text{C}^{6+} - \text{He}$ の計算結果を図 5.3 に示す。

また、裸酸素多価イオンでは、 $\text{O}^{8+} - \text{He}$ の系において実験を行った。なお、ECR イオン源を用いた O^{8+} の生成には $\text{C } ^{18}\text{O}$ ガスを使用した。これは、 ^{16}O では質量電荷比が $^{12}\text{C}^{6+}$ や $^{14}\text{N}^{7+}$ と等しくなってしまう、価数選別磁石で酸素の裸イオンのみを取り出すことができないためである。

$\text{O}^{8+} - \text{He}$ の結果を図 5.4 に示す。

$\text{O}^{8+} - \text{He}$ の計算結果を図 5.5 に示す。

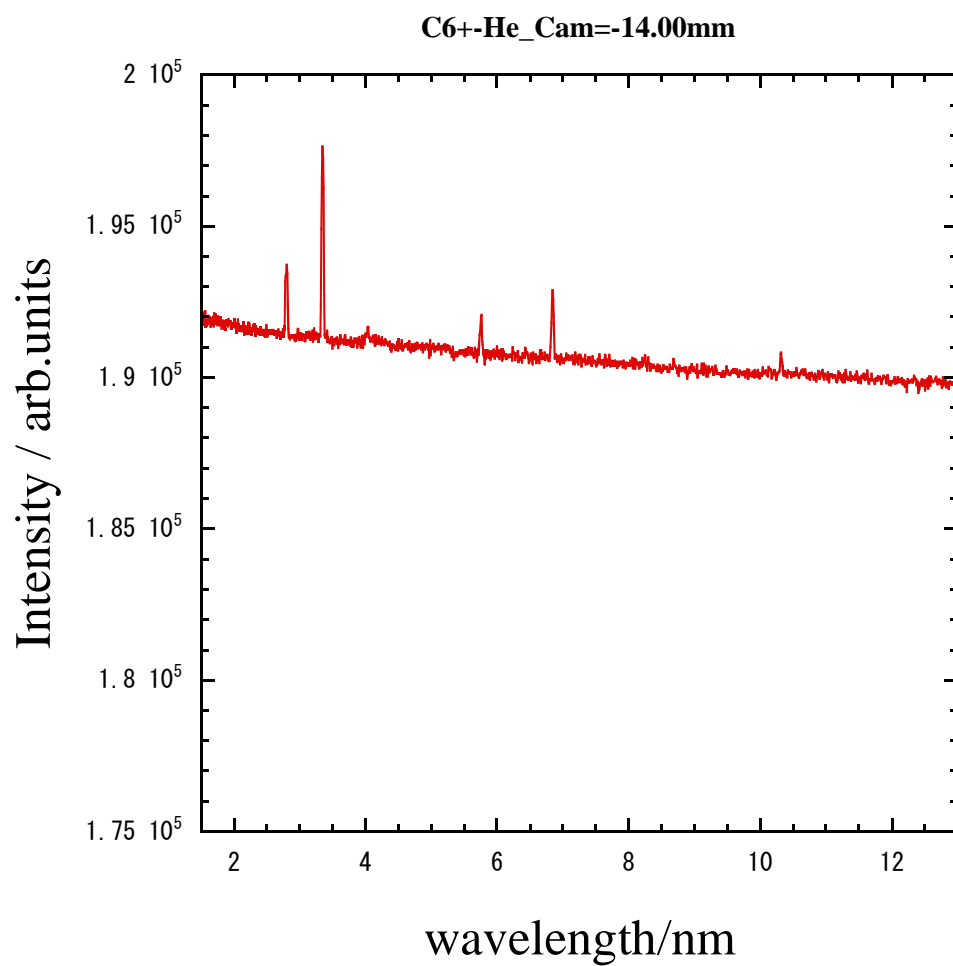


図 5.1 $^{13}\text{C}^{6+}$ -He において得られた極端紫外スペクトル (CCD 検出器位置=-14.00mm, $I(\text{C}^{6+}) \sim 250\text{nA}$)

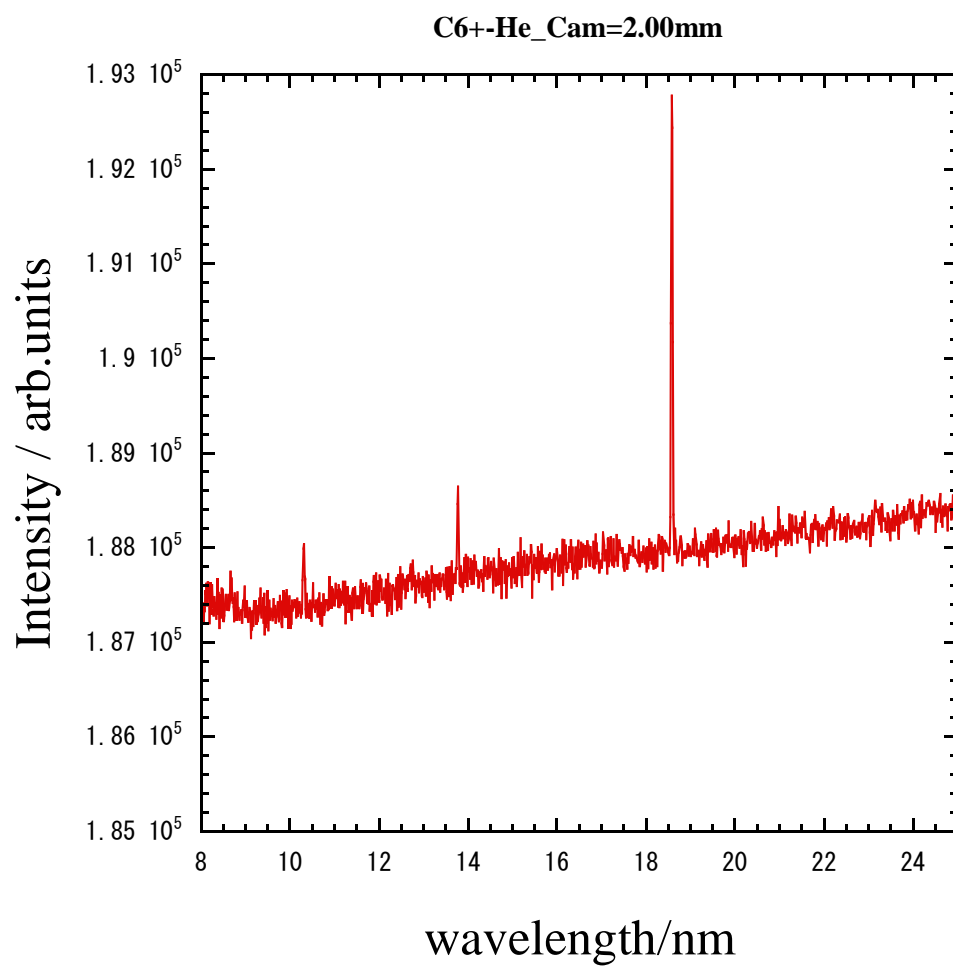


図 5.2 $^{13}\text{C}^{6+}$ -He において得られた極端紫外スペクトル (CCD 検出器位置=+2.00mm, $I(\text{C}5+)\sim 230\text{nA}$)

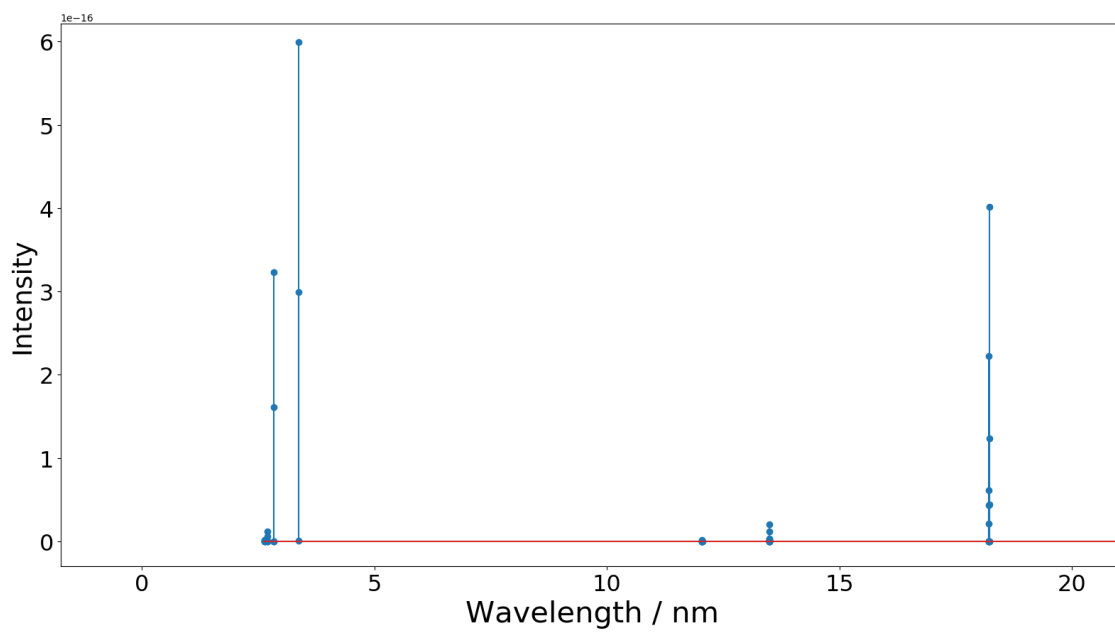


図 5.3 C⁶⁺-He において、計算で得られた極端紫外スペクトル

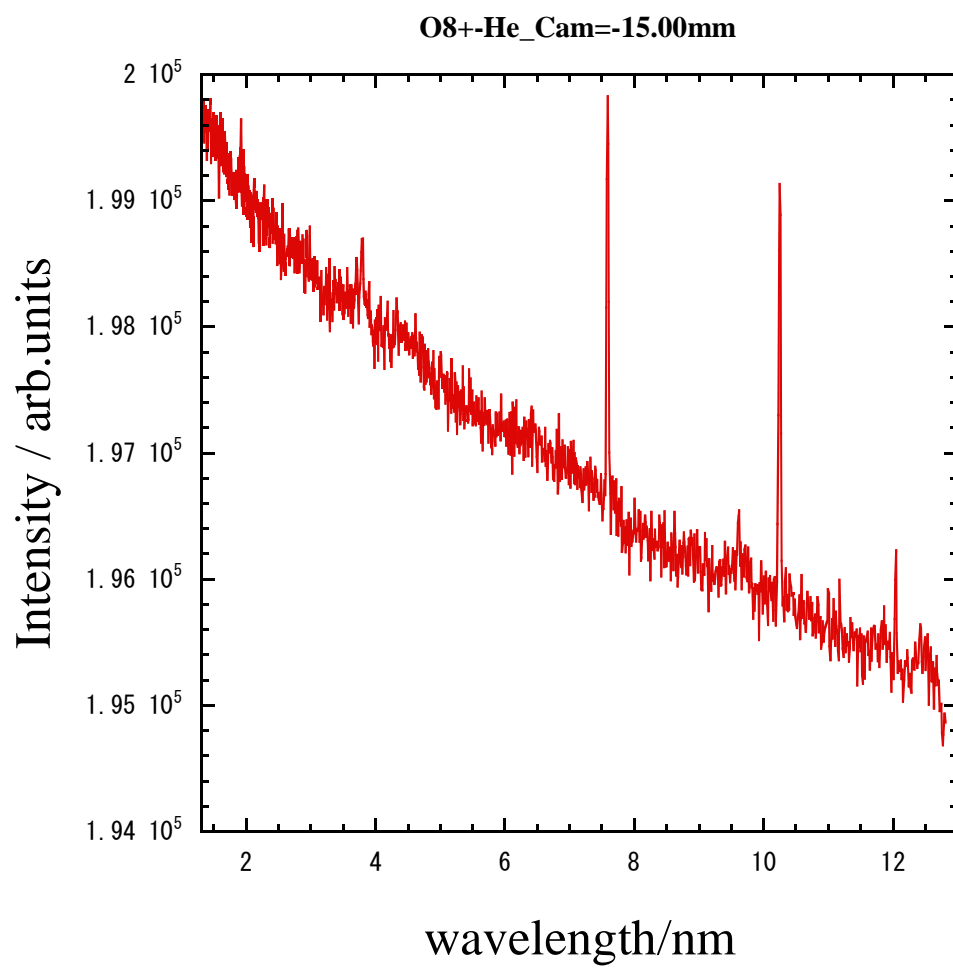


図 5.4 $O^{8+}-He$ において得られた極端紫外スペクトル (CCD 検出器位置 = -15.00 mm, $I(O^{7+}) \sim 37nA$)

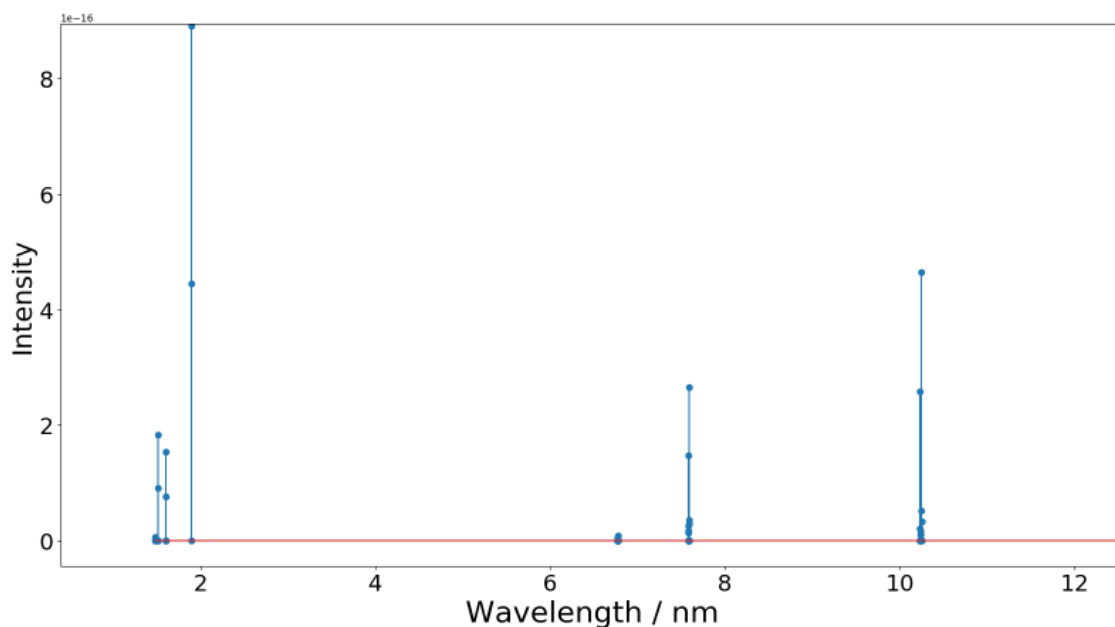


図 5.5 O^{8+} -He において計算で得られた極端紫外スペクトル

5.2 He 様 多価イオン

この節では、炭素、窒素多価イオンを入射イオンとした発光観測実験の結果について示す。また、この系の実験におけるイオンビーム電流 $I(N, O^{q+})$ を各図のキャプションに併せて示す。窒素多価イオンでは、 N^{5+} -He の系において実験を行った。なお、ECR イオン源を用いた N^{5+} の生成には N_2 ガスを使用した。

N^{5+} -He の結果を図 5.6 に示す。

N^{5+} -He の計算結果を図 5.7 に示す。

酸素多価イオンでは、 O^{6+} -He の系において実験を行った。なお、ECR イオン源を用いた O^{6+} の生成には O^2 ガスを使用した。

O^{6+} -He の結果を図 5.8 に示す。

O^{6+} -He の計算結果を図 5.9 に示す。

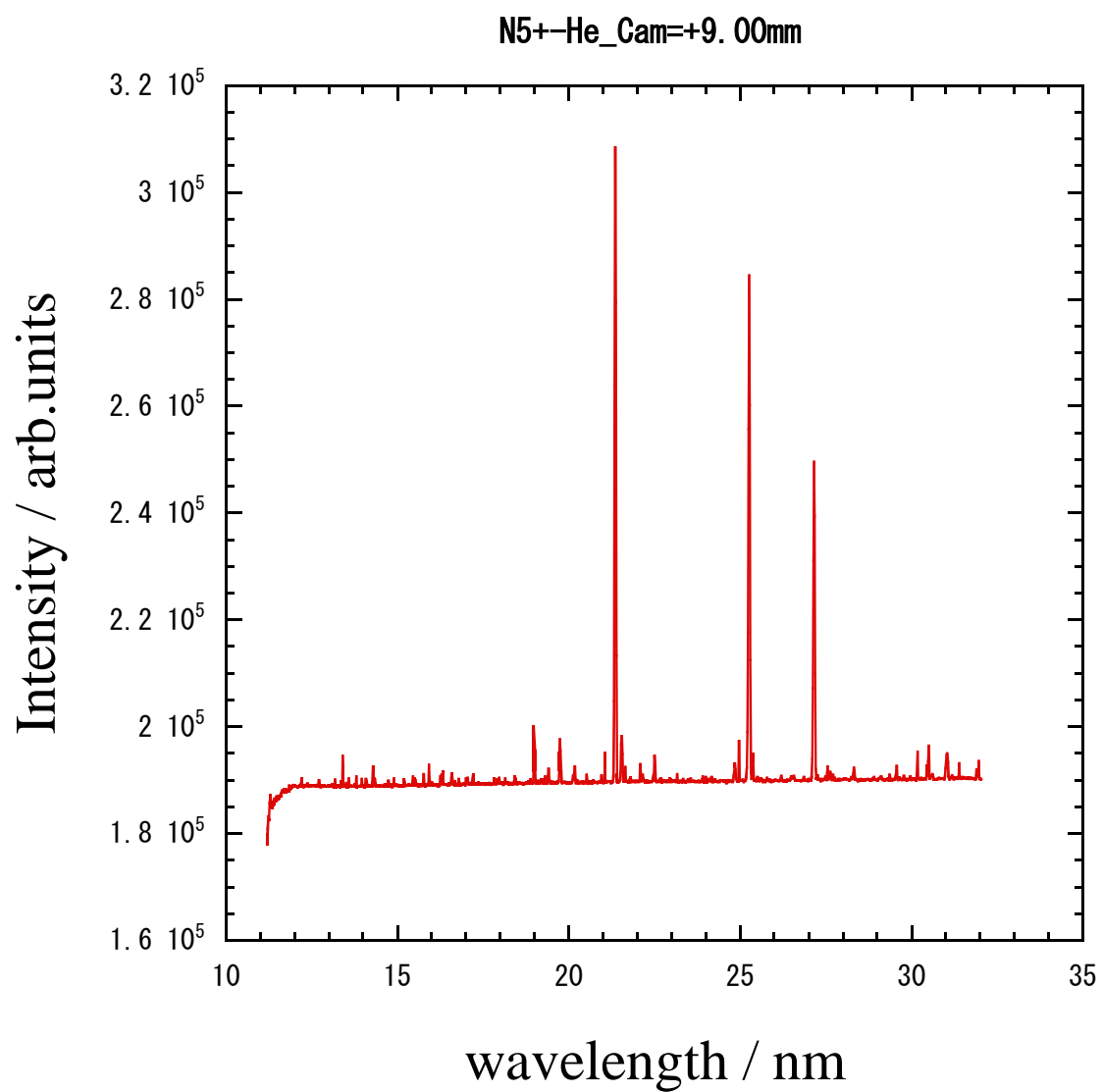


図 5.6 N^{5+} -He において得られた極端紫外スペクトル(CCD 検出器位置=+9.00mm, $I(N^{5+}) \sim 100\text{nA}$)

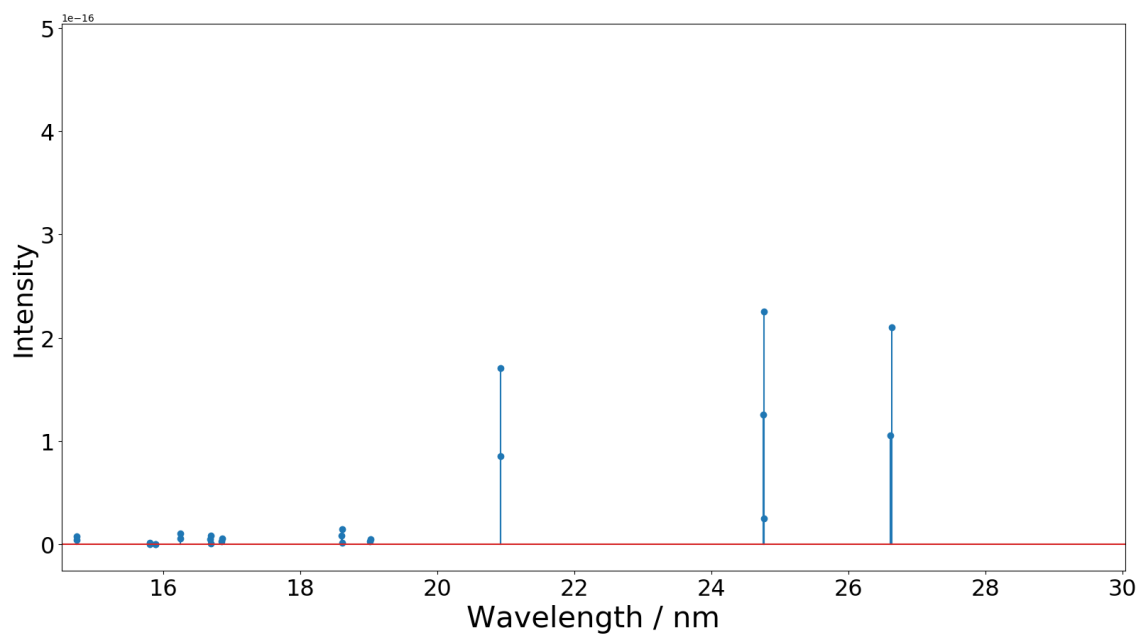


図 5.7 $N^{5+}-He$ において計算で得られた極端紫外スペクトル

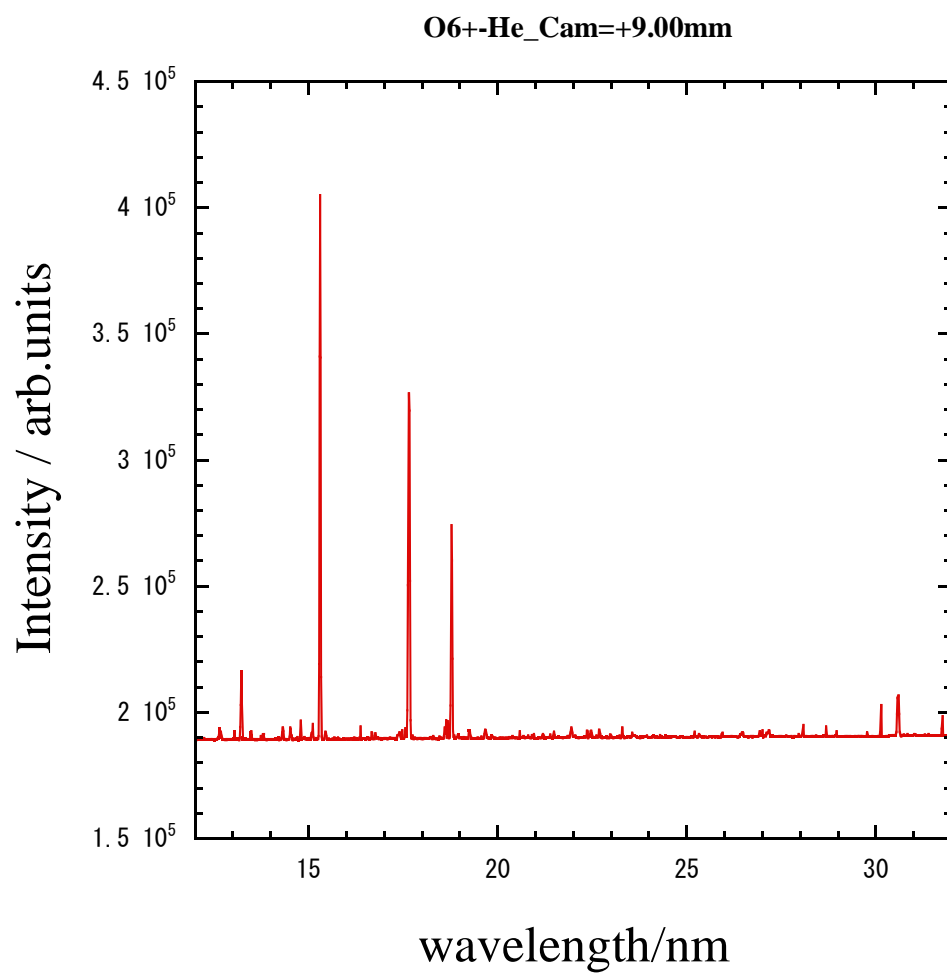


図 5.8 O^{6+} -He において得られた極端紫外スペクトル (CCD 検出器位置 = +9.00 mm, $I(O^{6+}) \sim 191 \text{ nA}$)

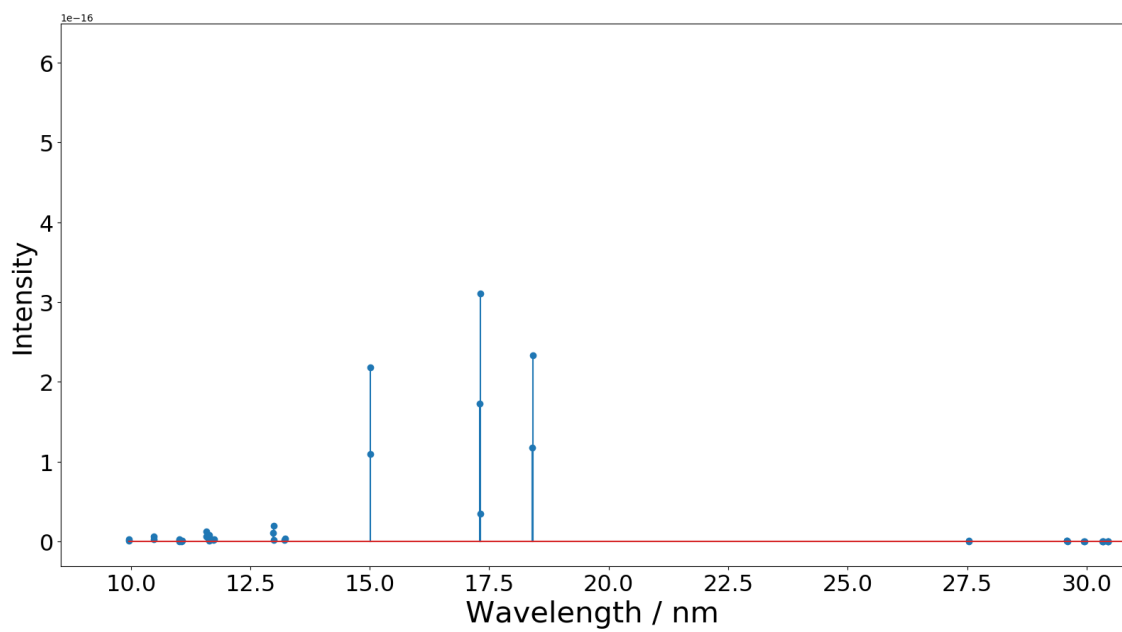


図 5.9 $O^{6+} - He$ において計算で得られた極端紫外スペクトル

第 6 章

シミュレーション結果と実験結果の比較

この章では、本研究において行ったシミュレーションと発光観測実験の結果の比較について記述する。

6.1 発光強度比分布

この節では、実験によって得られた各輝線の発光強度 $I_{\text{exp}}(\lambda)$ と、シミュレーションによって得られた各輝線の発光断面積 $\sigma_{\text{emi}}(\lambda)$ の比 $F^{-1}(\lambda) = \frac{\sigma_{\text{emi}}(\lambda)}{I_{\text{exp}}(\lambda)}$ について示す。

シミュレーションで計算されるのは、それぞれの電子状態のポピュレーション ρ の衝突セル内での時間変化である。この ρ と遷移速度(A 係数) A の積が発光強度に相当するが、 ρA の次元は $\text{Hz} (= \text{s}^{-1})$ である、発光強度と直接比較できる量にするには、イオンビームの速度 v と標的气体の数密度 N の積 vN で割る必要がある。この vN は次元が m^2s^{-1} であり、衝突のフラックスに相当する。こうして求めた物理量は m^2 の次元を持ち、理論的な発光断面積 σ_{emi} と見なすことができる：

$$\sigma_{\text{emi}}(\lambda) = \frac{\rho A(\lambda)}{vN} \quad (6.1)$$

一方、実験ではそれぞれの発光線に対して、面積強度としてのカウント数 $S(\lambda)$ が得られる。 $S(\lambda)$ はイオンビーム強度・標的气体の数密度・露光時間に比例する。CCD においては、生成電子数をカウント数に変換する際に、ADU(Analog-to-digital unit.)と呼ばれる設定によって、2 電子分の信号を1カウントとする設定になっているので、得られるカウント数を2で割ることで正しい電子の数に変換することができる。また、光子エネルギーをさらに電子正孔生成エネルギー w で割れば、電子数から1光子あたりのカウント数を求めることができる。 w の値は室温では3.64 (0.03) eVとされている[52]。温度を変数として直線的に変化するので、2つのデータから関数を求め、使っているCCDの温度である $-70^\circ\text{C} (= 203\text{ K})$ を代入すると $w = 3.70\text{ eV}$ となった。また、同時に測定されたイオンビーム電流の平均値 I_{ave} は、イオン価数 q と素電荷 e で割って平均粒子数強度 J_{ave} にする必要がある。気体粒子の数密度 N は、理論気体を仮定して気体温度を考慮して求める。従って、標的圧力 P 、気体温度 T 、露光時間 t を用いた次の量が理論値と比較できる規格化された発光強度 $I_{\text{exp}}(\lambda)$ となる：

$$I_{\text{exp}}(\lambda) = S(\lambda) \left(\frac{I_{\text{ave}}}{qe} \cdot \frac{P}{kT} \cdot t \right)^{-1} = \frac{S(\lambda)}{J_{\text{ave}} \cdot N \cdot t} \quad (6.2)$$

但し, k は Boltzmann 定数である. この $I_{\text{exp}}(\lambda)$ の次元は m^3 となり, 実験値と理論値の比が装置関数 $F(\lambda)$ である:

$$F^{-1}(\lambda) = \frac{\sigma_{\text{emi}}(\lambda)}{I_{\text{exp}}(\lambda)} \quad (6.3)$$

m^{-1} の次元を持つ $F(\lambda)$ の値は, 観測領域の長さ当たりという意味を持ち, 装置のセットアップが同じであれば, 波長 λ だけに依存する量になる筈である. 多くの異なる波長の発光について $F(\lambda)$ を求め, 適当な関数でフィットする(あるいは補間する)ことで, 任意の波長についても $F^{-1}(\lambda)$ の値を用意しておけば, 未知の発光についても, 強度を $I_{\text{exp}}(\lambda)$ として測定すれば, $F^{-1}(\lambda)$ との積を取ることで発光断面積 $\sigma_{\text{emi}}(\lambda)$ が得られる.

図 6.1 に, 本研究で行った実験によって観測された全ての輝線に関する発光強度比分布 $\frac{\sigma_{\text{emi}}(\lambda)}{I_{\text{exp}}(\lambda)}$ を示す. これは実験によって得られた発光強度から発光断面積を求めるための規格化因子に相当する値である.

図 6.1 より, 波長 10 nm 付近を中心とした谷型の構造が確認できる.

また, 図 6.2 に $F(\lambda) = \frac{I_{\text{exp}}(\lambda)}{\sigma_{\text{emi}}(\lambda)}$ のグラフを示す.

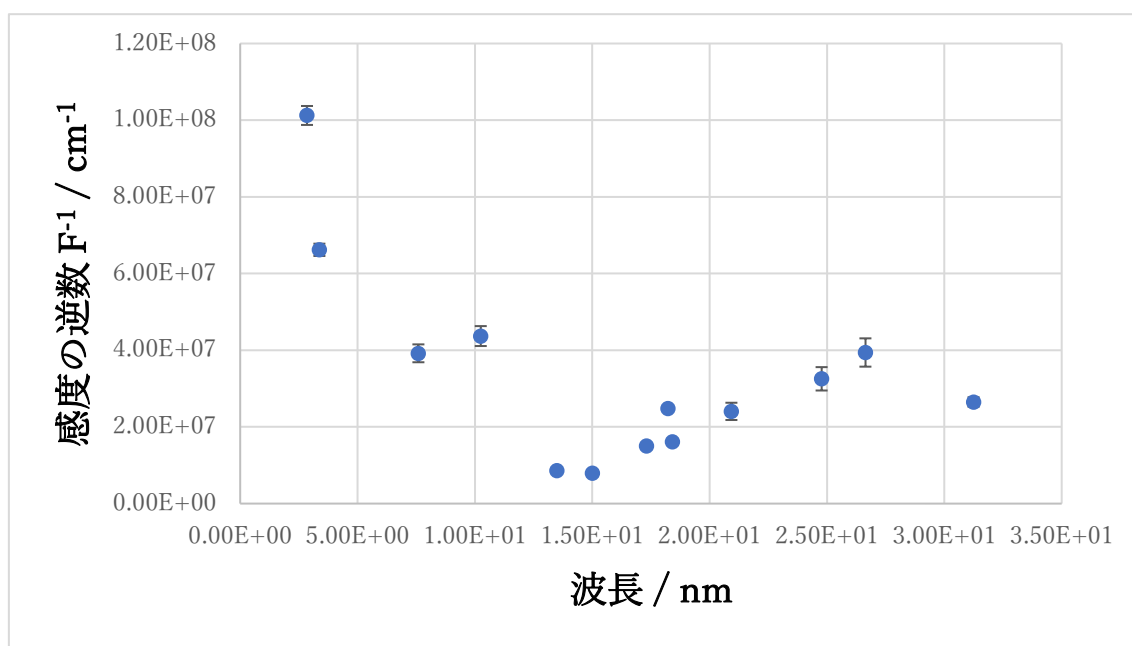


図 6.1 実験 – 計算の間の発光強度比分布

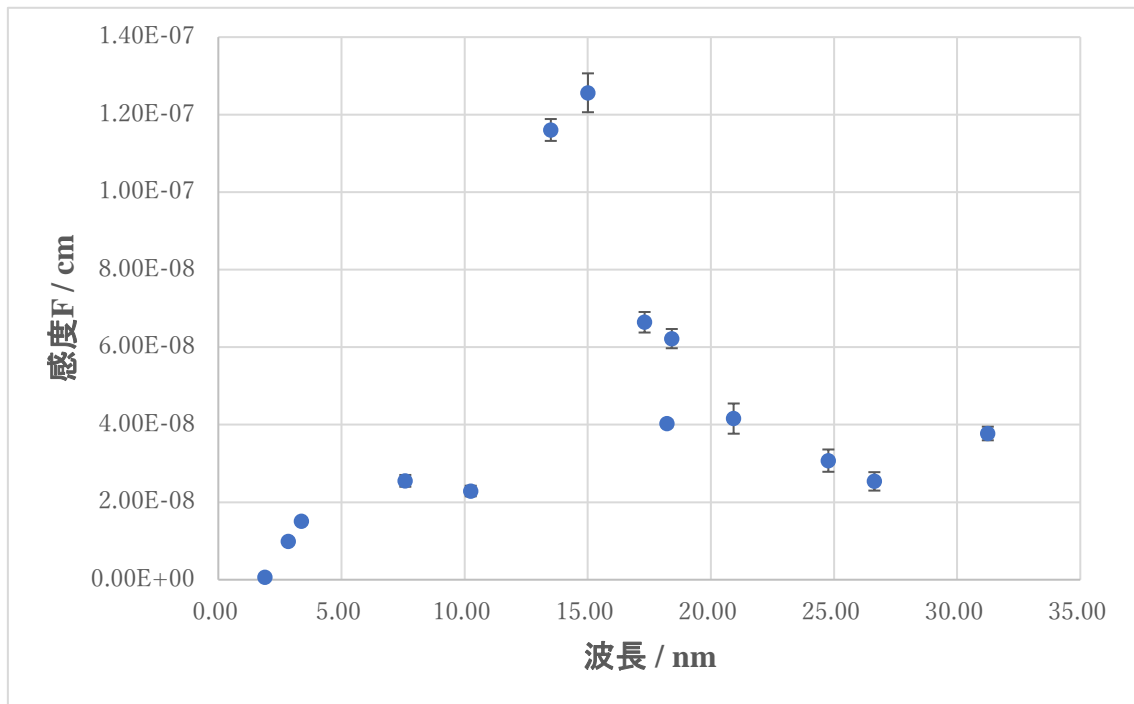


図 6.2 実験 – 計算の間の発光強度比(2)

6.2 実験と計算の比較

図 6.1 の、輝線の発光強度比より得られた検出効率は、波長 10 nm 付近に極大を持っていた。本研究で使用した回折格子は 5 - 20 nm の波長領域用に開発されたもので、8 nm 付近に最も高い回折効率を持っている。また、斜入射の金ミラーも 8 nm より長波長では 90% 程度の高い反射効率を持つが、2 nm では 45% 程度にまで低下してしまう。これらのことから、短波長領域における検出効率の低下は、集光ミラーと回折格子の特性に依ると理解できる。また、10 nm より長波長領域での検出効率の低下は、回折格子の特性に加えて、CCD 表面の薄い SiO₂ 層および炭素を含む汚染物質に起因すると考えられる。

6.3 実験装置の検出感度について

EUV 分光器での検出感度を考えるためには、集光ミラーの反射率、回折格子の効率、CCD の感度の 3 つのデバイスの波長に依存する特性に関する情報が必要である。

以下、図 6.3-6 にミラーの反射率、回折格子の効率、CCD の感度を示す。

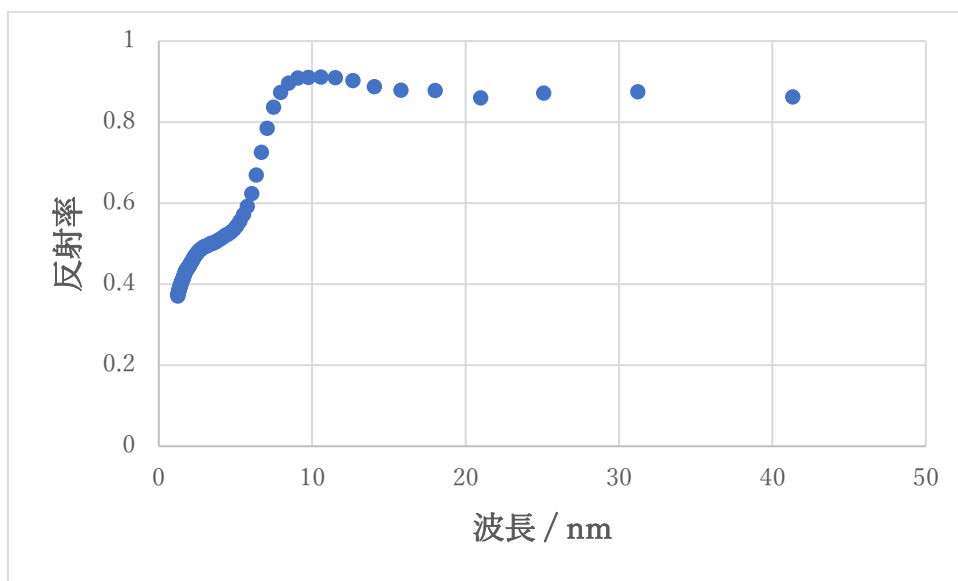


図 6.3 ミラーの反射率

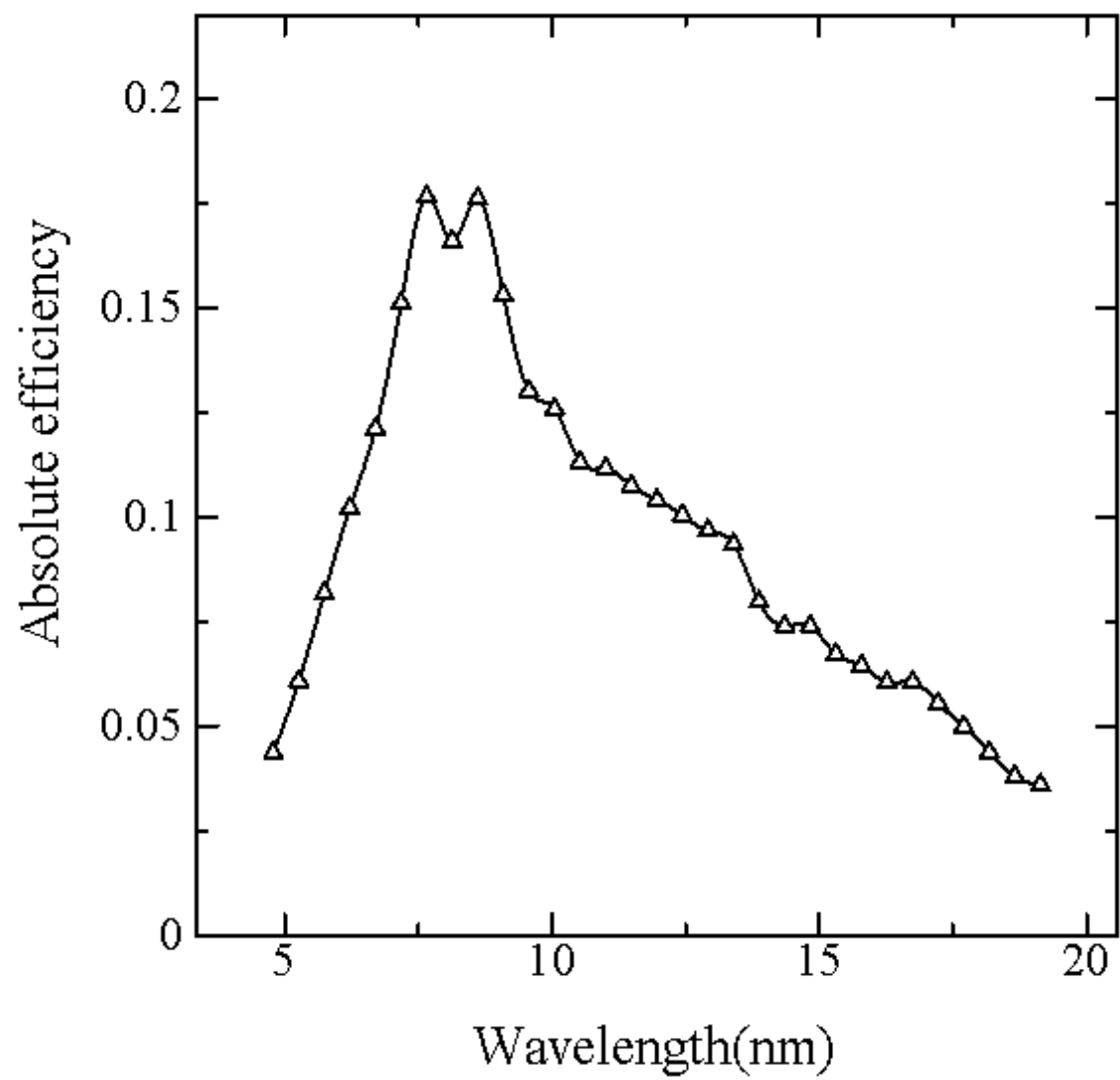


図 6.4 回折格子の効率

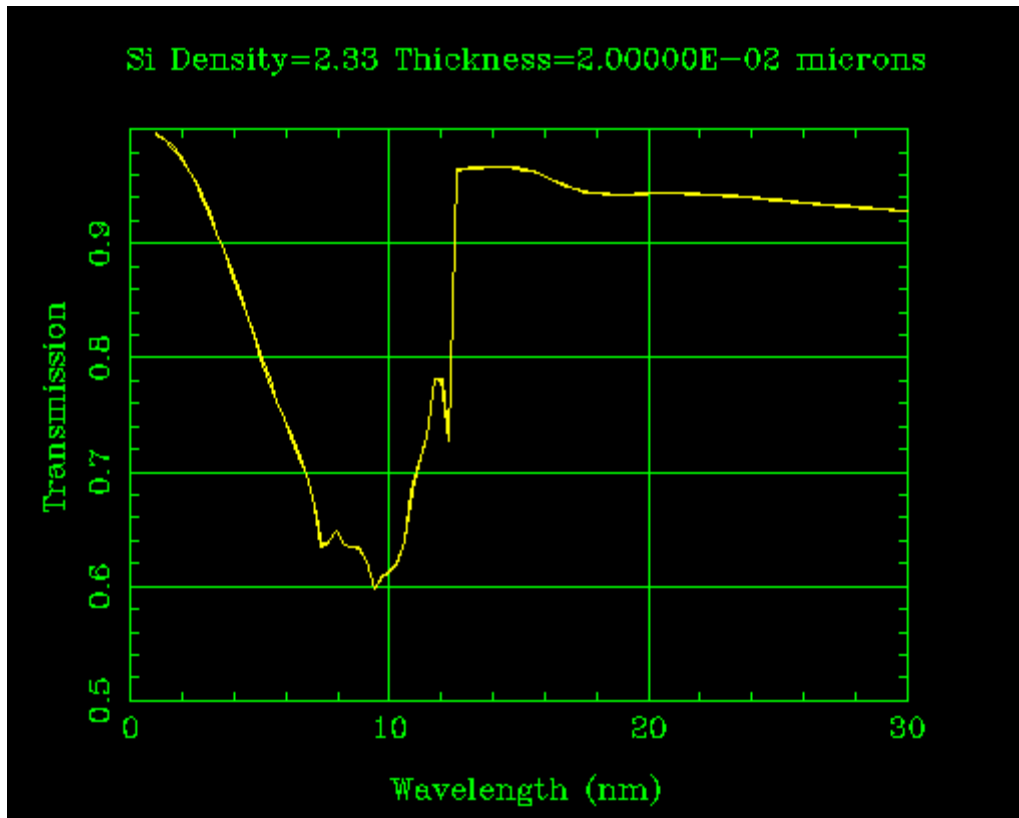


図 6.5 Si の透過率

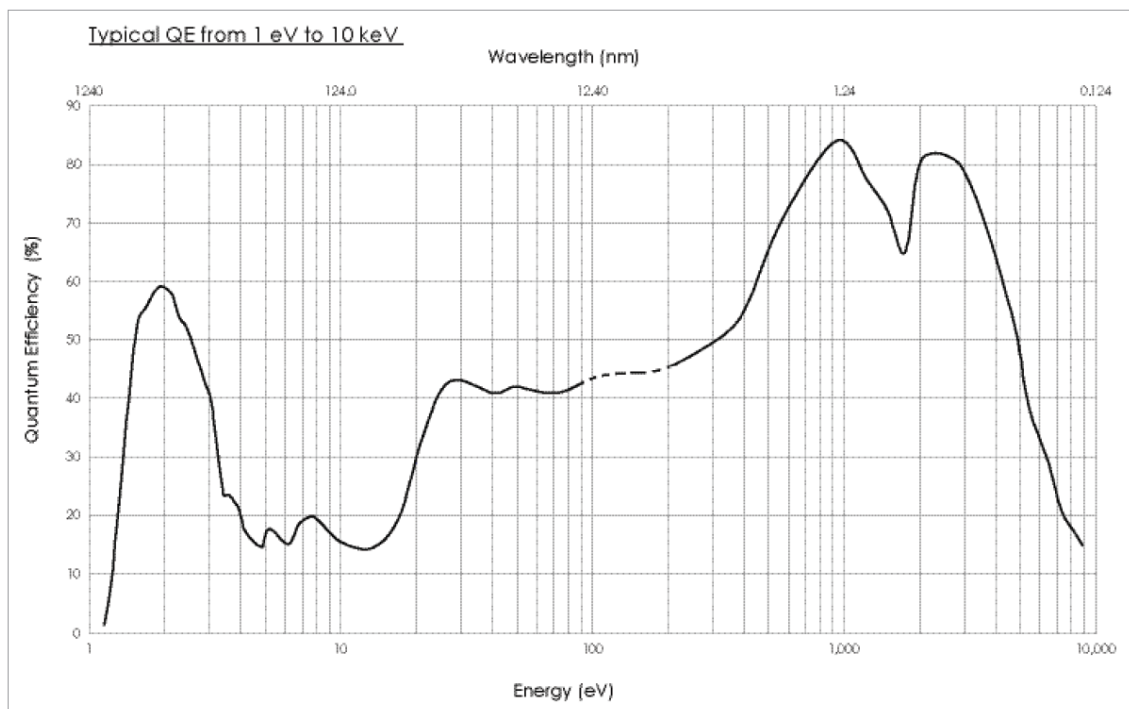


図 6.6 CCD カメラの量子効率

6.4 誤差評価

式(6.2)から発光断面積の誤差は次のように表すことができる.

$$\Delta\sigma_{exp} = \sum_{i=1}^5 \left(\frac{\partial\sigma_{exp}}{\partial x_i} \right) \Delta x_i \quad (6.7)$$

$x_1 \Rightarrow S$ (検出光子数)

$x_2 \Rightarrow I_{ave}$ (平均イオン電流強度)

$x_3 \Rightarrow P$ (標的気体圧力)

$x_4 \Rightarrow T$ (標的気体温度)

$x_5 \Rightarrow t$ (測定時間)

発光断面積の統計誤差を以下表 6.1 に示す.

パラメータ	誤差
カウント数[S]	$\Delta S \sim \sqrt{S}$
電流値[I]	10%
ガス圧力[P]	1%
温度[T]	$\Delta T \sim 2K$
測定時間[t]	$\Delta t \sim 5s$

表 6.1: 発光断面積の誤差評価

実験を行った衝突系では, 衝突セルを通過した後にあるファラデーカップで測定したイオン電流は最小で 1nA 程度で, 電流値を測定しているデジタルマルチメータでの測定限界に近く不確かさが大きい. そのため, 発光断面積における誤差は全ての測定点において 10 %程度をもつ結果となった.

図 6.1 には誤差も含めた結果を示している.

6.5 理論的発光断面積の比較

従来の発光断面積の議論では、電荷移行衝突の時間発展は考慮せず、電子捕獲断面積と分岐比(Branching Ratio)のみを使用した方法で発光断面積を求めてきた。分岐比とは、ある状態から次の状態への遷移の割合を示す比である。始状態として、各状態にそれぞれの電子捕獲断面積を与え、分岐比に従って電子捕獲断面積を遷移、加算することで従来の方法での理論的発光断面積が計算される。計算された発光断面積 $\sigma_0(\lambda)$ と、衝突セル中心部からの観測を仮定した理論的発光スペクトル $\sigma_{exp}(\lambda)$ の強度の間での比を取ったものを図 6.4 に示す。

結果、時間発展を考慮したものと、考慮しないものでは最大 15%程度の差が見られた。このことから、有限の長さを持つ観測領域での発光を観測する実験においては、時間発展を考慮する必要があることが分かった。以上の理由から、実験で得られた発光断面積の絶対値は時間発展を考慮し得られた理論的発光断面積と比較した。

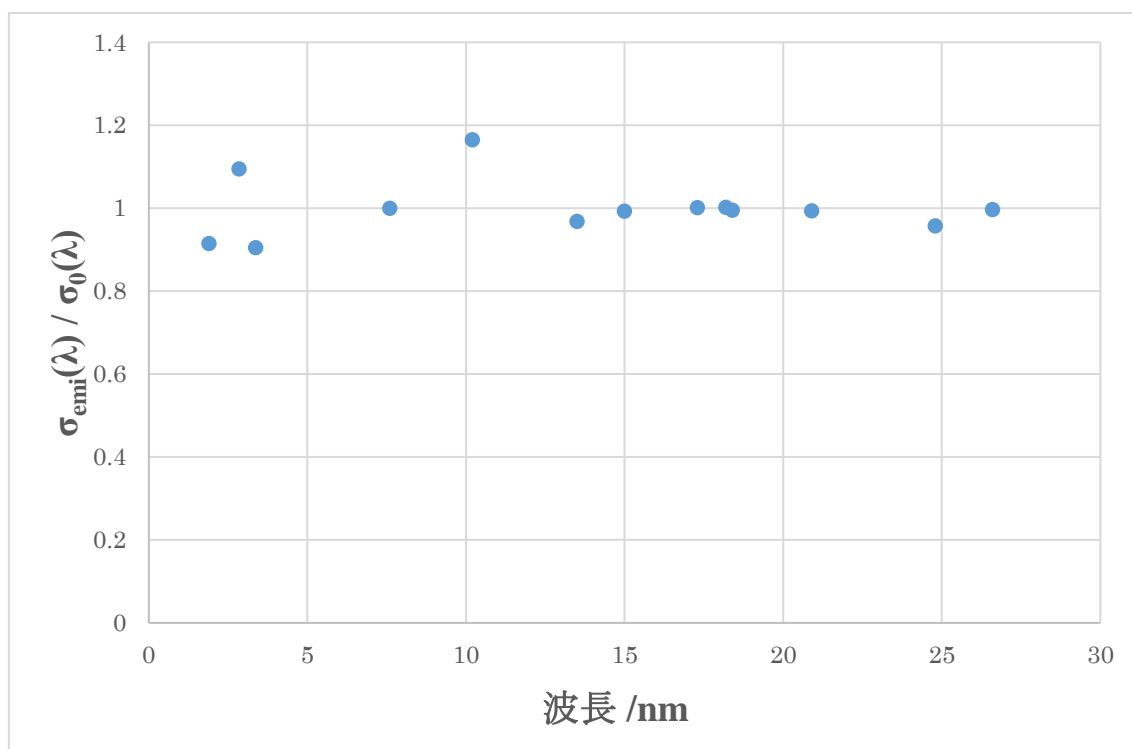


図 6.7 理論的発光断面積-理論的発光スペクトル比

第7章 まとめ

本研究では、太陽風電荷交換反応が起こる宇宙空間とほぼ同じ衝突条件下で、裸および He 様の炭素、窒素、酸素の多価イオンと中性粒子の電荷移行衝突における分光スペクトル観測実験を行った。そして、原子基底緊密結合 (Atomic Orbital Close Coupling, AOCC) 法による高精度な電荷移行断面積の理論計算値および励起状態間の光学遷移速度に関する文献値を用いて、実測スペクトルに対応する理論的なスペクトルを計算した。そして、実測値と計算値を比較することで、観測波長に依存する装置の絶対検出感度を求めた。

実験においては、計算を行ったのと同じ炭素、窒素、酸素の裸、およびヘリウム様の多価イオンを使用して極端紫外線発光の観測を行った。また、禁制遷移や異重項間遷移を除く寿命の短い遷移における、従来の分岐比を用いた方法で求められた発光断面積と、シミュレーションによって求められた理論的発光スペクトルの間の比は波長に依らずほぼ一定であることが確認された。

共同研究者によって計算された電子捕獲断面積と、本研究で開発した時間に依存した電荷移行衝突過程のシミュレーションプログラムを用いて、観測領域からの発光スペクトルを計算し、実測スペクトルとの比較を行った。実測スペクトルの観測に際しては、標的気体密度、イオンビーム電流強度、および露光時間について慎重な測定を行い、これらの測定誤差を考慮した上で、2 - 27 nm の波長範囲にある計 13 本の輝線について、理論値と実測値の比から絶対的な検出効率を求めた。

得られた検出効率は波長 10 nm 付近に極大を持っていた。本研究で使用した回折格子は 5 - 20 nm の波長領域用に開発されたもので、8 nm 付近に最も高い回折効率を持っている。また、斜入射の金ミラーも 8 nm より長波長では 90% 程度の高い反射効率を持つが、2 nm では 45% 程度にまで低下してしまう。これらのことから、短波長領域における検出効率の低下は、集光ミラーと回折格子の特性に依ると理解できる。また、10 nm より長波長領域での検出効率の低下は、回折格子の特性に加えて、CCD 表面の薄い SiO₂ 層および炭素を含む汚染物質に起因すると考えられる。これらの各要素について正確な見積をすることは困難であるが、理論計算値との直接比較によって絶対検出感度を推定する方法は、理論計算の精度が高ければ極めて有効な方法と言える。特に、圧力測定およびイオンビーム強度測定を今回と同じ計器を用いて行う場合には、測定機器の系統誤差がキャンセルできる点は特筆に値する。

以上の結果から、分光器の測定条件を同一にしている限り、2 - 27 nm の波長範囲において、高い精度で発光断面積の絶対測定を行うことが可能となった。

今後、さらに多くの実験と計算を比較することで、発光断面積を求めるためのより高精度な規格化因子を決定することで、本研究室の発光観測実験における発光断面積の決定に大きく貢献する

ものと考えられる.

参考文献

- [1] T. A. Carlson *et al.*, *At. Data* 2 63 (1970).
 - [2] W. Lotz *et al.*, *Opt. Soc. Am.* 58 915 (1968).
 - [3] B. L. Schram *et al.*, *Physica* 32 184 (1966).
 - [4] P. Briand *et al.*, *Nucl. Instrum. Methods* 127 441 (1975).
 - [5] R. Geller, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* NS-23 904 (1976).
 - [6] E. D. Donets, *USSR Inventor's Certificate* No.248860 (1967); *Byull. OIPOTZ* No.23 65 (1969).
 - [7] E. D. Donets, *IEEE Trans. Nucl. Sci.* NS-23 897 (1976).
 - [8] Giacconi. R *et al.*, *ApJ* 551 624 (2001).
 - [9] Y. Tanaka *Space Sci. Rev.* 20 815 (1977).
 - [10] D. McCammon *et al.*, *ARAA* 28 657 (1990).
 - [11] S. L. Snowden *et al.*, *ApJ* 424 714 (1994).
 - [12] T. E. Cravens *et al.*, *Science* 296 1042 (2002).
 - [13] T. E. Cravens *et al.*, *Science* 532 L153 (2000).
 - [14] R. Fujimoto *et al.*, *PASJ* 59 S133 (2007).
 - [15] S. L. Snowden *et al.*, *ApJ* 610 1182 (2004).
 - [16] S. Katsuda *et al.*, *ApJ* 730 24 (2004).
 - [17] J. Liu *et al.*, *Mon. Not. R. Astron. Soc.* 415 L64 (2004).
 - [18] J. B. Greenwood *et al.*, *Apj* 63 062707 (2001).
 - [19] 神田拓真, 修士論文(2010)
 - [20] I. N. Draganic *et al.*, *PRA* 83 054701 (2011).
 - [21] P. Beiersdorfer *et al.*, *Science* 300 1558 (2003).
- 73
- [22] 石田卓也, 修士論文(2012)
 - [23] H. Ryufuku *et al.*, *Phys. Rev. A* 21 745-750 (1980).
 - [24] A. B'ar'any *et al.*, *Nucl. Instrum. Methods* B 9 397-399 (1985).
 - [25] A. Niehaus, *Nucl. Instrum. Methods* B 31 359-366 (1988).
 - [26] L. Liu, *et al.*, *JPB* 45 015202 (2011).
 - [27] H. Tanuma *et al.*, *J. Chin. Chem. Soc.* 48 389-394 (2001).
 - [28] V. V. Balashov *et al.*, ' Polarization and Correlation Phenomena in Atomic Collisions ' ,
(Kluwer, New York) 2003, p.117.
 - [29] U. Fano and J. H. Macek, *Rev. Mod. Phys.*, 45, 553 (1973).
 - [30] K. Ishii *et al.*, *PRA* 70 042716 (2004).

- [31] Greenwood *et al.*, *Astrophysical Journal*, (2008)
- [32] Kimura, Olson *et al.*, *J. Phys. B: At. Mol. Phys.* 17 L713.(1984)
- [33] Fritsch *J. Phys. B* 19. 2683.(1986).
- [34] Ohyama-Yamaguchi, *JPSJ* 56. No.5. pp1693-1702.
- [35] Private communication
- [36] V. V. Afrosimov *et al.*, *Pis' ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 31 p.635 (1980).
- [37] V. V. Afrosimov *et al.*, *Pis' ma Zh. Eksp. Teor. Fiz.*, 34 p.179 (1981).
- [38] R. A. Phaneuf *et al.*, *PRA* 26 1892 (1982).
- [39] F. W. Meyer *et al.*, *PRA* 32 p.3310 (1985).
- [40] K. Okuno *et al.*, *At. Plasma-Master. Interact. Data Fusion* 10 163 (2002).
- [41] M. N. Panov *et al.*, *Phys. Scr.* T3 124 (1983).
- [42] Kaxanskii *et al.*, *Soviet Phys. Tech. Physics* 27 1064-1068(1982).
- [43] T. Iwai *et al.*, *PRA* 26 105 (1982).
- [44] Toshima *et al.*, *PRA* 50.p39400(1994).
- [45] Ryufuku *et al.*, *PRA* 19.p1538(1979).
- [46] T. A. Green *et al.*, *PRA* 25p1364(1982)

74

- [47] R. E. Olson *et al.*, *PRA* E 14 579 (1976)
- [48] A. Muller *et al.*, *Phys. Lett.* 62A 391 (1977)
- [49] A. Muller *et al.*, *Phys. Lett.* 70A 419 (1979)
- [50] M. Kimura *et al.*, *JPB* E 28 L643 (1995)
- [51] NIST Atomic Spectra Database
- [52] Schloze *et al.*, *Phys. Lett.* , 69, 2974(1996)

<http://physics.nist.gov/PhysRefData/ASD/index.html>